

УДК 541.124:542.943.7:547.264

## СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ И ОКИСЛЕНИЯ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В ПРОЦЕССЕ ОКИСЛЕНИЯ ЧЕТЫРЕХ ИЗОМЕРОВ БУТАНОЛА

© 2020 г. М. Li<sup>a</sup>, G. Xu<sup>a, \*</sup>, Y. Zhao<sup>a, b</sup>, Z. Wang<sup>c</sup>, S. Liu<sup>c</sup>

<sup>a</sup>School of Automotive Engineering, Changshu Institute of Technology, Changshu, Jiangsu 215500, P. R. China

<sup>b</sup>School of Computer Science & Technology, Soochow University, Suzhou, Jiangsu 215006, P. R. China

<sup>c</sup>School of Automotive and Traffic Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, P. R. China

\*e-mail: xuguangju@cslg.edu.cn

Поступила в редакцию 26.04.2019 г.

После доработки 17.07.2019 г.

Принята к публикации 11.09.2019 г.

Проведен расчетный анализ образования и окисления полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) в ходе процесса окисления *n*-, *втор*-, *изо*- и *трет*-бутанолов при следующих условиях: эквивалентное отношение равно 1.5, начальное давление 1.0 атм, температурный интервал 800–2000 К, реактор идеального смешения. Полученные результаты указывают на то, что степень разветвления цепочки приводит к повышению мольной доли ПАУ. Наиболее высокую способность к образованию ПАУ проявляет *трет*-бутанол, что объясняется повышенной долей β-C–H связей этого изомера. Анализ скорости образования продуктов приводит к выводу, что роль радикала OH в процессе окисления ПАУ особенно заметна в превращении *n*- и *изо*-бутанолов, гидроксильная группа которых присоединена к терминальному углеродному атому. По сравнению с тремя другими изомерами бутанола *трет*-бутанол вносит наиболее значительный вклад в скорость образования ПАУ через маршруты C<sub>5</sub> и C<sub>9</sub>.

**Ключевые слова:** изомеры бутанола, полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), образование продуктов, окисление, кинетическое моделирование, анализ скорости образования продуктов

DOI: 10.31857/S0453881120010050

## Comparative Study on the Formation and Oxidation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Combustion of Four Butanol Isomers

M. Li<sup>1</sup>, G. Xu<sup>1, \*</sup>, Y. Zhao<sup>1, 2</sup>, Z. Wang<sup>3</sup>, S. Liu<sup>3</sup>

<sup>1</sup>School of Automotive Engineering, Changshu Institute of Technology, Changshu, Jiangsu, 215500, P. R. China

<sup>2</sup>School of Computer Science & Technology, Soochow University, Suzhou, Jiangsu, 215006, P. R. China

<sup>3</sup>School of Automotive and Traffic Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu, 212013, P. R. China

\*e-mail: xuguangju@cslg.edu.cn

Received April 26, 2019; revised July 17, 2019; accepted September 11, 2019

The formation and oxidation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) precursors during the combustion of *n*-, *sec*-, *iso*- and *tert*-butanol are computationally investigated at an equivalence ratio of 1.5, an initial pressure of 1.0 atm and a temperature range from 800 to 2000 K in a perfectly stirred reactor. The results indicate that branched chain structure led to an increase in the mole fraction of PAHs. Tert-butanol has the greatest ability in forming PAHs, it can be attributed to the advantage in the β-C–H bonds number. The rate of production analysis reveals that for the butanol isomers with the hydroxyl (OH) group attached to a terminal carbon (*n*- and *iso*-butanol), the role of OH radical in the oxidation process of PAHs is enhanced. Compared to the other three butanol isomers, a significant increase in the contribution ratios of C<sub>5</sub> and C<sub>9</sub> pathways to the formation of PAHs for tert-butanol is observed.

**Keywords:** butanol isomers, polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), formation, oxidation, kinetic modeling, rate of production analysis