

ОСОБЕННОСТИ ТЕМПЕРАТУРНОЙ КОНВЕРСИИ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА ПОЛИПРОПИЛЕНА И АВТОМОБИЛЬНЫХ ШИН*

А. М. Тереза¹, Г. Л. Агафонов², С. П. Медведев³, Г. Н. Мохин⁴

Аннотация: На основе доступных экспериментальных данных по пиролизу полипропилена (ПП) и автомобильных шин (АШ) проведено численное моделирование конверсии их прямых газофазных продуктов до углеводородов C₅ включительно. Расчеты проводились в условиях постоянного начального атмосферного давления в диапазоне температур от 600 до 900 К. Численное моделирование кинетики процесса показало, что различные детальные кинетические механизмы (ДКМ) схожим образом описывают качественные особенности конверсии продуктов пиролиза ПП и АШ. Однако в расчетах обнаружено, что изменение температуры, при которой происходит конверсия, существенно отличается при расчетах по разным ДКМ. Установлено, что при конверсии продуктов пиролиза ПП и АШ увеличивается доля метана и молекулярного водорода, при этом основным источником молекулярного водорода является конверсия углеводородов C₄ и C₅. С повышением начальной температуры конверсия продуктов пиролиза ПП происходит плавным образом, в то время как при пиролизе АШ она протекает с заметным периодом индукции и последующим резким, взрывообразным ростом температуры.

Ключевые слова: пиролиз; утилизация; полипропилен; автомобильные шины; продукты газификации; конверсия продуктов пиролиза; численное моделирование; химическая кинетика; детальный кинетический механизм

DOI: 10.30826/CE20130305

Литература

1. Kaminsky W. Recycling of polymers by pyrolysis // J. Phys. IV, 1993. Vol. 3. P. 1543–1552.
2. Zhang G.-H., Zhua J.-F., Okuwaki A. Prospect and current status of recycling waste plastics and technology for converting them into oil in China // Resour. Conserv. Recycl., 2007. Vol. 50. Iss. 3. P. 231–239.
3. Czajczyńska D., Anguilano L., Ghazal H., Krzyżyńska R., Reynolds A. J., Spencer N., Jouhara H. Potential of pyrolysis processes in the waste management sector // Therm. Sci. Eng. Prog., 2017. Vol. 3. P. 171–197.
4. Onwudili J. A., Insura N., Williams P. T. Composition of products from the pyrolysis of polyethylene and polystyrene in a closed batch reactor: Effects of temperature and residence time // J. Anal. Appl. Pyrol., 2009. Vol. 86. P. 293–303.
5. Williams P. T. Pyrolysis of waste tyres: A review // Waste Manage., 2013. Vol. 33. P. 1714–1728.
6. Гончаров И. В., Веклич М. А. Бескислородная конверсия насыщенных углеводородов C₁–C₄ в условиях барьерного разряда // Фундаментальные исследования, 2014. № 9. Ч. 1. С. 64–69.
7. Zeaiter J. A process study on the pyrolysis of waste polyethylene // Fuel, 2014. Vol. 133. P. 276–282.
8. Gaurh P., Pramanik H. Production of benzene/toluene/ethyl benzene/xylene (BTEX) via multi-phase catalytic pyrolysis of hazardous waste polyethylene using low cost fly ash synthesized natural catalyst // Waste Manage., 2018. Vol. 77. P. 114–130.
9. Зайченко В. М. Исследование процессов комплексной высокотемпературной энерготехнологической переработки природного газа: Дис. . . . д-ра техн. наук. — М.: ОИВТ РАН, 2000. 263 с.
10. Song B. The product yield of pyrolysis of biomass and a kinetic study of gasification of biomass char. — South Korea: Kunsan National University. 2014. PhD Thesis.
11. Abbas-Abadi M. S., Haghghi M. N., Yeganeh H., McDonald A. G. Evaluation of pyrolysis process parameters on polypropylene degradation products // J. Anal. Appl. Pyrol., 2014. Vol. 109. P. 272–277. doi: 10.1016/j.jaap.2014.05.023.
12. Wang L., Lei H., Liu J., Bu Q. Thermal decomposition behavior and kinetics for pyrolysis and catalytic pyrolysis of Douglas fir // RSC Adv., 2018. Vol. 8. P. 2196–2202.
13. Conesa J. A., Ortuño N., Palmer D. Estimation of industrial emissions during pyrolysis and combustion of different

* Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2019–2023 гг. по теме ФИЦ ХФ РАН № 49.23, при финансовой поддержке Госзадания АААА-А18-118031590088-8.

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, tereza@chph.ras.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, gennady_l@mail.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, s.p_medvedev@chph.ras.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, mokhin@gmail.com

- wastes using laboratory data // *Sci. Rep.*, 2020. Vol. 10. No. 1. Article No. 6750. doi: 10.1038/s41598-020-63807-w.
14. *Kruse T. M., Wong H.-W., Broadbelt L. J.* Mechanistic modeling of polymer pyrolysis: Polypropylene // *Macromolecules*, 2003. Vol. 36. P. 9594–9607.
 15. *Tereza A. M., Agafonov G. L., Anderzhanov E. K., Vasilik N. Y., Medvedev S. P., Khomik S. V., Brykov N. A.* Numerical simulation of benzene high temperature pyrolysis // *High Temp. Mater. Proc.*, 2019. Vol. 29. Iss. 4. P. 291–302.
 16. *Тереза А. М., Агафонов Г. Л., Андержанов Э. К., Медведев С. П., Хомик С. В., Петров С. К., Чернышов М. В.* Кинетика конверсии продуктов газификации полипропилена и автомобильных покрышек // *Хим. физика*, 2020. Т. 39. № 8. С. 58–63.
 17. *Фролов С. М., Звезгинцев В. И., Аксёнов В. С., Билера И. В., Казаченко М. В., Шамшин И. О., Гусев П. А., Белоцерковская М. С., Коверзанова Е. В.* Детонационная способность воздушных смесей продуктов пиролиза полипропилена // *Горение и взрыв*, 2018. Т. 11. № 4. С. 44–60.
 18. *Kee R. J., Rupley F. M., Meeks E., Miller J. A.* CHEMKIN III. — Livermore, CA, USA: Sandia National Laboratories, 1996. Technical Report No. SAND96-8216.
 19. *Burcat A., Ruscic B.* Third Millennium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables. — Chicago, IL, USA: Argonne National Laboratory; Tel-Aviv: Technion-Israel Institute of Technology, 2005. Technical Report TAE-960. <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>.
 20. *Ranzi E., Frassoldati A., Grana R., Cuoci A., Faravelli T., Kelley A. P., Law C. K.* Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels // *Prog. Energ. Combust.*, 2012. Vol. 38, No. 4. P. 468–501. <http://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics/menu-kinetics-detailed-mechanisms>.
 21. *Husson B., Ferrari M., Herbinet O., Ahmed S. S., Glaude P.-A., Battin-Leclerc F.* New experimental evidence and modeling study of the ethylbenzene oxidation // *P. Combust. Inst.*, 2013. Vol. 34. No. 1. P. 325–333. <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00772058>.
 22. *Cai L., Pitsch H.* Optimized chemical mechanism for combustion of gasoline surrogate fuels // *Combust. Flame*, 2015. Vol. 162. P. 1623–1637.
 23. *Zhang Y., Cai J., Zhao L., Yang J., Jin H., Cheng Z., Li Y., Zhang L., Qi F.* An experimental and kinetic modeling study of three butene isomers pyrolysis at low pressure // *Combust. Flame*, 2012. Vol. 159. P. 905–917.
 24. *Cho M.-H., Jung S.-H., Kim J.-S.* Pyrolysis of mixed plastic wastes for the recovery of benzene, toluene, and xylene (BTX) aromatics in a fluidized bed and chlorine removal by applying various additives // *Energ. Fuel.*, 2010. Vol. 24. P. 1389–1395.
 25. *Ramirez-Canon A., Muñoz-Camelo Y. F., Singh P.* Decomposition of used tyre rubber by pyrolysis: Enhancement of the physical properties of the liquid fraction using a hydrogen stream // *MDPI Environments*, 2018. Vol. 5. P. 72–83.
 26. *Perondi D., Scopel B. S., Collazzo G. C., Silva J. P., Botome M. L., Dettmer A., Godinho M., Vilela A. C. F.* Characteristics of pyrolysis products from waste tyres and spent foundry sand Co-pyrolysis // *Prog. Rubber Plast. Re.*, 2016. Vol. 32. No. 4. P. 213–240.
 27. *Ding K., Zhong Zh., Zhang B., Wang J., Min A., Ruan R.* Catalytic pyrolysis of waste tire to produce valuable aromatic hydrocarbons: An analytical Py-GC/MS study // *J. Anal. Appl. Pyrol.*, 2016. Vol. 122 P. 55–56.
 28. *Lewandowski W. M., Januszewicz K., Kosakowski W.* Efficiency and proportions of waste tyre pyrolysis products depending on the reactor type — a review // *J. Anal. Appl. Pyrol.*, 2019. Vol. 140. P. 25–53.

Поступила в редакцию 12.06.2020