

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ».

Физический факультет

Кафедра общей физики

Никулина Яна Андреевна

КУРСОВАЯ РАБОТА

**Исследование состава продуктов горения синтез-газа методом  
молекулярно-пучковой масс-спектрометрии**

Электромагнитный практикум, 2 курс, группа №19304

**Научный руководитель:**

к.ф.-м.н. Д. А. Князьков

Оценка научного руководителя

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Преподаватель практикума**

С. В. Туманов

Оценка преподавателя практикума

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Куратор практикума:**

к.т.н. В. Т. Астрелин

Итоговая оценка

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

Новосибирск 2020

## **Аннотация**

Целью работы являлось изучение принципа работы квадрупольного масс-спектрометра с ионизацией электронным ударом, а также знакомство с методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии и измерение с его помощью состава продуктов горения в пламени синтез-газа при атмосферном давлении. Для достижения этой цели методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии были измерены интенсивности пиков масс в пламени синтез-газа, на основе которых были получены зависимости мольных долей реагентов (водород:  $\text{H}_2$ , монооксид углерода:  $\text{CO}$ ), основных (вода:  $\text{H}_2\text{O}$ , диоксид углерода:  $\text{CO}_2$ , кислород:  $\text{O}_2$ ) и промежуточных (гидропероксильный радикал:  $\text{HO}_2$ ) продуктов горения от высоты над горелкой.

Ключевые слова: квадрупольный масс-спектрометр, молекулярно-пучковая масс-спектрометрия, синтез-газ, горение.

## Оглавление

<b>Введение</b> .....	4
<b>1. Описание экспериментальной методики</b> .....	6
<b>1.1 Метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии (МПМС)</b> .....	6
<b>1.2 Принцип работы квадрупольного масс-спектрометра</b> .....	7
<b>1.3 Исследуемое пламя</b> .....	9
<b>2. Обработка и анализ результатов</b> .....	10
<b>Заключение</b> .....	18
<b>Список литературы</b> .....	19

## Введение

Данная работа посвящена исследованию продуктов горения синтез-газа методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Масс-спектрометрия является физико-химическим методом анализа, заключающимся в переводе молекул образца в ионизированную форму с последующим разделением и регистрацией образующихся при этом положительных и отрицательных ионов. Масс-спектрометр позволяет сделать выводы о молекулярной массе соединения, его составе и структуре. Масса самого тяжелого иона в спектре равна молекулярной массе анализируемого соединения.

В настоящее время масс-спектрометрия считается наиболее востребованным и чувствительным методом анализа органических молекул, чему способствовало интенсивное развитие физики элементарных частиц и открытие за последние тридцать лет новых методов ионизации молекул. Современные масс-спектрометрические методы очень хорошо подходят для анализа природных соединений, поскольку дают возможность получать информацию о точных молекулярных массах, структуре, то есть каким образом отдельные структурные фрагменты соединены друг с другом в составе молекулы и количественном содержании. Кроме того, по данным масс-спектра можно сделать вывод относительно размера и структуры углеродных заместителей, что трудно установить другими методами.

Основным, наиболее часто применяемым в масс-спектрометрии методом ионизации, является электронный удар. Молекулы в газовой фазе бомбардируются пучком электронов, эмитируемых нагретым до высокой температуры катодом и ускоренных до заданной энергии разностью потенциалов между анодом и катодом. Под воздействием ионизирующих электронов молекулы приобретают избыточную энергию, которая вызывает деструкцию молекулярного иона с образованием осколочных (фрагментных) и перегруппированных ионов, характеризующих структуру изучаемого вещества. Масс-спектрометрия электронного удара дает наиболее воспроизводимые масс-спектры индивидуальных соединений.

В связи со стремительным развитием науки и техники, производство не стоит на месте, что приводит к загрязнению окружающей среды. Исследование химических процессов, происходящих при горении, имеет большое значение для разработки экологически безопасных энергетических устройств и двигателей внутреннего сгорания. Метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии (МППМС) позволяет исследовать состав продуктов горения и таким образом обеспечивать необходимую экспериментальную базу для разработки моделей горения.

Цель данной работы - исследование состава продуктов горения пламени синтез-газа методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии. Синтез-газ является экологически чистым топливом. Знание химического механизма его горения позволяет разрабатывать современные энергетические устройства.

Для достижения данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Ознакомиться с принципом работы квадрупольного масс-спектрометра.
2. Ознакомиться с методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии.
3. Методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии измерить интенсивность пиков масс, соответствующих реагентам и продуктам горения в пламени синтез-газа.
4. На основе полученных данных установить зависимость мольной доли реагентов, основных и некоторых промежуточных продуктов горения синтез - газа от высоты над горелкой.

## 1. Описание экспериментальной методики

### 1.1 Метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии (МПМС)

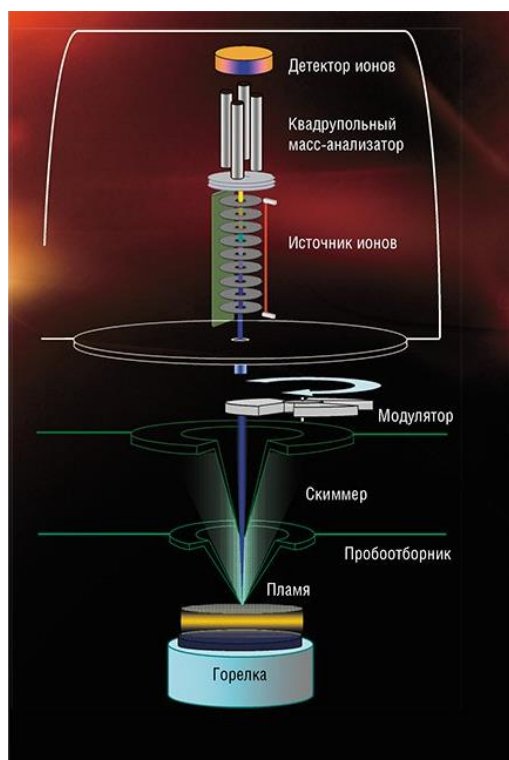


Рис. 1. Схема МПМС - установки

Метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии позволяет отбирать пробу из пламени, идентифицировать в ней соединения, включая активные частицы, измерять их концентрацию и пространственное распределение. Схема МПМС-установки представлена на рис. 1. Она представляет собой вакуумную систему с трехступенчатой откачкой. Основными составляющими установки являются пробоотборник, скиммер и масс-спектрометр. Пробоотборник позволяет отбирать газовую пробу из пламени, стабилизированного на горелке. В качестве пробоотборника применялся тонкостенный кварцевый конус. Внутренний угол конуса  $40^\circ$  и диаметр отверстия при вершине 0.05 мм, толщина стенки вблизи кончика составляла 0.08 мм. При расширении газа в вакуум за пробоотборником формируется молекулярный пучок. В молекулярном пучке молекулы движутся, не сталкиваясь друг с другом, поэтому химическое взаимодействие между ними невозможно. Фактически происходит «замораживание» отобранной пробы, то есть состав пробы в молекулярном пучке соответствует составу газа до момента входа в пробоотборник. Скиммер вырезает наиболее невозмущенную центральную часть пучка, который далее направляется в область ионизации, где в результате бомбардировки электронами образуются положительно заряженные ионы. Полученные ионы затем разделяются с помощью масс-спектрометра.

## 1.2 Принцип работы квадрупольного масс-спектрометра

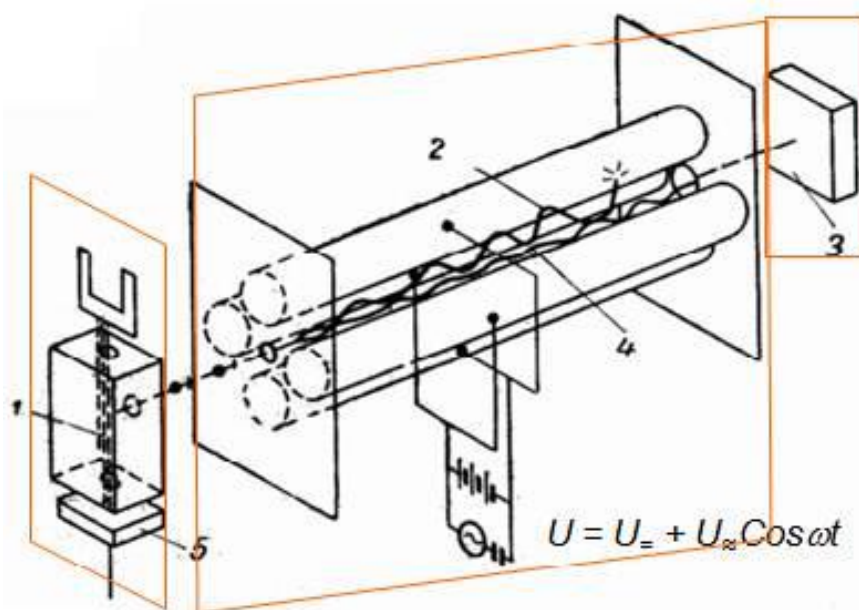


Рис. 2. Принципиальная схема квадрупольного масс-спектрометра: 1 – ионизирующий пучок электронов; 2 – резонансный ион; 3 – детектор ионов; 4 – нерезонансный ион; 5 – коллектор электронов

Исследуемый газ ионизируется в источнике ионов и выталкивается в виде ионного пучка через диафрагму в пространство анализатора. Отфильтрованные в анализаторе ионы определенной массы регистрируются детектором ионов 3, который работает обычно в режиме счета ионов.

В анализаторе прибора разделение ионов по массам происходит за счет действия квадрупольного электрического поля, создаваемого четырьмя параллельными цилиндрическими стержнями. Стержни находятся под таким напряжением постоянного или переменного тока, что в определенное время сквозь них могут проходить ионы какого-то одного значения отношения массы к заряду. Таким образом, меняя напряжение, сканируются различные ионы с разными показателями. При этом в области поперечного сечения, близкой к продольной оси прибора  $z$ , создается гиперболическое электрическое поле

Заряженная частица, двигающаяся вдоль оси прибора  $z$ , будет раскачиваться высокочастотным полем, причем амплитуда колебаний зависит как от массового числа ионизированной частицы, так и от напряжения на стержнях. Ионы, амплитуда колебаний которых остается меньше  $r_0$ , могут беспрепятственно

проходить через квадрупольное поле. Можно подобрать параметры поля так, что в зависимости от подаваемого напряжения через фильтр будут проходить ионы одной определенной массы.

Ионы, прошедшие весь путь и пропущенные квадруполем, попадают на активную поверхность детектора и генерируют электрический сигнал. В качестве детектора используется вторичный электронный умножитель ВЭУ-6. Активная поверхность детектора испускает электрон всякий раз, как о нее ударяется ион. Далее электрон попадает в систему умножения сигнала. Каскад электронов нарастает, пока не образуется измеримый сигнал. Эти сигналы поступают в систему сбора данных. В системе подсчитывается количество таких сигналов, которое пропорционально количеству ионов, прибывших на детектор. Все результаты в конечном итоге поступают на компьютер.

Установка, используемая в данной работе, оборудована квадрупольным масс-спектрометром МС-7302 с мягкой ионизацией электронным ударом (разброс по энергиям электронов составляет около  $\pm 0.25$  эВ). При измерении интенсивности массовых пиков энергия ионизации устанавливалась индивидуально для каждого исследуемого вещества такой, чтобы, с одной стороны, она была выше потенциала ионизации вещества и имела при этом приемлемое соотношение сигнал/шум, а с другой стороны, была не слишком высокой, чтобы не допустить или, по крайней мере, минимизировать вклад от осколочных ионов других соединений.



### 1.3 Исследуемое пламя

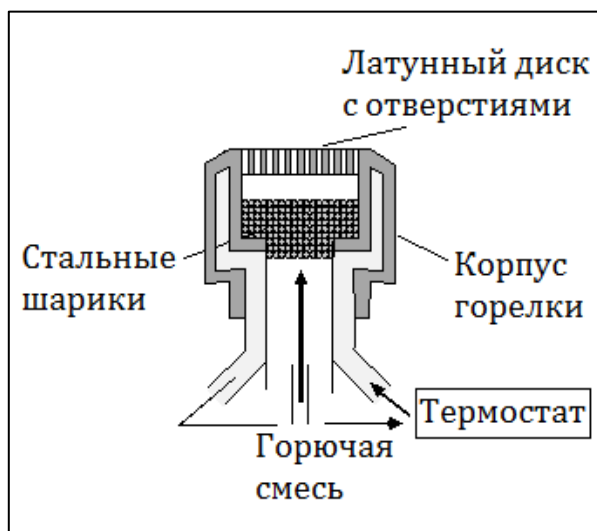


Рис. 3. Схема горелки Бота - Сполдинга

Исследуемое пламя стабилизировалось на плоской горелке Бота-Сполдинга (рис.3) при атмосферном давлении. Горелка представляла собой латунный диск с отверстиями (диаметр отверстий 0.5 мм, расстояние между центрами 0.7 мм) диаметром 16 мм и толщиной 3 мм, закрепленный в латунном корпусе, снабженном водяной рубашкой. Корпус горелки был заполнен шариками из

нержавеющей стали диаметром 3 мм, что обеспечивало равномерную скорость потока горючей смеси по всей поверхности горелки, а также прогрев горючей смеси по всей поверхности горелки. Температура воды, пропускаемой через водяную рубашку, поддерживалась равной 95°C с помощью термостата. Концентрации газовых компонентов горючих смесей задавались с помощью регуляторов массового расхода газа (MKS Instruments Inc.). Исследовалось пламя горючей смеси синтез-газа, состав которой приведен в таблице 1. Скорость потока исходной горючей смеси поддерживалась равной 59,9 см<sup>3</sup>/с.

Вещество	Мольная доля
H <sub>2</sub>	0,05509182
CO	0,05509182
O <sub>2</sub>	0,05509182
Ar	0,834724541

Таблица 1. Состав горючей смеси исследуемого пламени

## 2. Обработка и анализ результатов

В результате эксперимента были получены интенсивности различных массовых пиков, соответствующих различным соединениям в пламени, в зависимости от расстояния над горелкой (профили интенсивности сигналов). Погрешность измерения интенсивности пиков масс зависит от фонового сигнала, а также от концентрации соединений, однако для всех пиков она не превышала  $\pm 15\%$ .

В таблице 2 приведены значения энергий ионизирующих электронов, используемые в работе, а также энергии ионизации веществ. В таблице 3 представлены интенсивности пиков масс продуктов горения синтез-газа в зависимости от высоты над горелкой, полученные в ходе эксперимента методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии.

Формула	H	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	O <sub>2</sub>	NO <sub>2</sub>	Ar	CO <sub>2</sub>
m/z	1	2	18	28	32	33	40	44
Энергия ионизации, эВ	13,6	15,43	12,61	14,01	12,07	11,35	15,76	13,77
Энергия ионизирующих электронов, эВ	16,65	16,65	15,4	14,35	14,35	16,65	16,2	15,4

Таблица 2. Энергии ионизации веществ и ионизируемых электронов

Расстояние от горелки, мм	Интенсивность пика масс, отн.ед.							
	H	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	O <sub>2</sub>	HO <sub>2</sub>	Ar	CO <sub>2</sub>
0,1	41	5265	339	3087	9358	3	124928	1
0,2	24,333	4781	1092,7	3166,3	9158	25	123880	195,67
0,3	11,333	4259	2026,7	3181	8805,3	34,667	123032	421
0,4	8,3333	3826	3072	3164	8477,3	24,333	122643	1016,7
0,5	23,333	3342	4850,7	2997,7	7878,7	30	121858	1560,7
0,6	43,333	2946	6940	2840	7346	28,333	122005	2522,7
0,7	53,667	2509,3	10060	2567,7	6242	30	121458	3355,7
0,8	78,667	2107	13383	2481	4948	17,667	122934	4793
0,9	116,33	1747,3	16733	2283,3	3170,3	12,333	121781	6235,7
1	160,67	1514,7	19031	2217,7	1852,3	7,6667	122557	7728,7
1,1	185,67	1368,3	20834	2042,3	820,33	6,6667	121374	8842,3
1,2	172,67	1301	21284	1931	450,67	2,6667	119302	9349,7
1,3	154,33	1252	20870	1827	241,33	1	115873	9727
1,4	134,67	1245,3	19982	1691,3	188,67	0	114802	9905,7
1,5	110,33	1264,3	19475	1683,3	86	0	113170	10113
1,6	95,333	1328	18824	1562	26	0	113762	10298
1,8	67	1375,7	18292	1543,3	0	0	111742	10411
2	72,667	1416,7	17628	1460,3	0	0	113538	10800
2,5	54,333	1400,7	17313	1441,3	14	0,6667	112192	11441
4	51,333	1411	16710	1410,3	0	1,3333	108980	12032
6	37	1411,5	16418	1386,5	0	1	106649	12448

Таблица 3. Зависимости интенсивности пиков масс продуктов горения синтез – газа от высоты над горелкой

На рис. 4-5 представлены зависимости интенсивности пиков масс реагентов и продуктов горения в пламени синтез-газа от высоты над горелкой, полученные по данным таблицы 3.

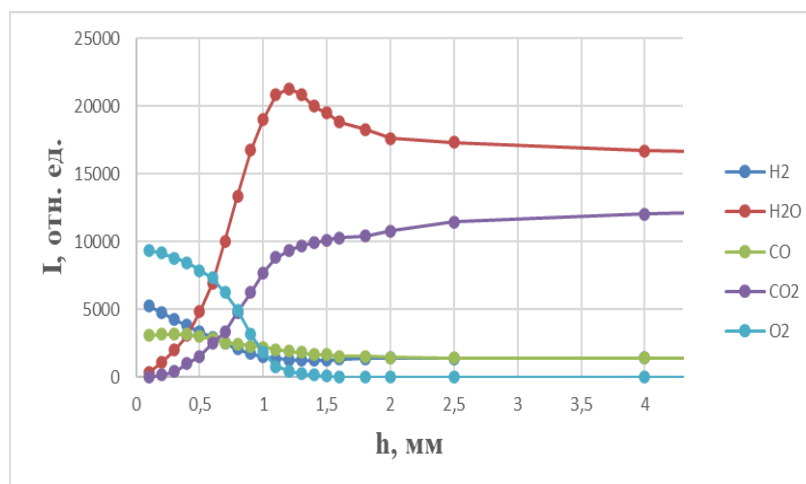


Рис. 4. Зависимость интенсивностей пиков масс (I) реагентов и основных продуктов горения в пламени синтез – газа от высоты (h) над горелкой

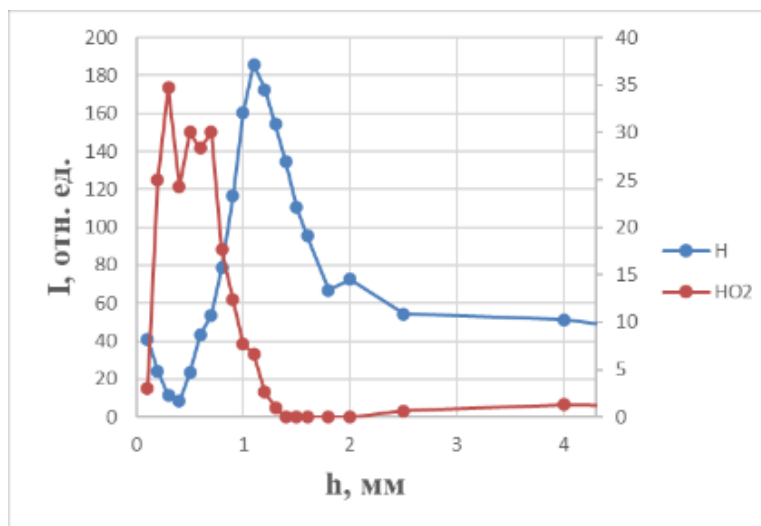


Рис. 5. Зависимости интенсивностей пиков масс (I) промежуточных продуктов горения в пламени синтез – газа от высоты (h) над горелкой

Профили молярных долей соединений в пламени получены из профилей интенсивности соответствующих массовых пиков следующим образом. Сначала все профили интенсивностей были нормированы на профиль интенсивности, соответствующий аргону - основному компоненту пламени, чтобы избавиться от зависимости получаемых сигналов от температуры по зоне пламени. Нормированные профили интенсивности представлены в таблице 4. Эти значения далее использовались при вычислении молярных долей соединений в пламени.

Расстояние от горелки, мм	Нормированная интенсивность пика масс, отн. ед.						
	$i_H$	$i_{H_2}$	$i_{H_2O}$	$i_{CO}$	$i_{O_2}$	$i_{NO_2}$	$i_{CO_2}$
0,1	0,0003	0,0421	0,0027	0,0247	0,0749	2E-05	8,0046E-06
0,2	0,0002	0,0386	0,0088	0,0256	0,0739	0,0002	0,00157948
0,3	9E-05	0,0346	0,0165	0,0259	0,0716	0,0003	0,00342187
0,4	7E-05	0,0312	0,025	0,0258	0,0691	0,0002	0,00828964
0,5	0,0002	0,0274	0,0398	0,0246	0,0647	0,0002	0,01280726
0,6	0,0004	0,0241	0,0569	0,0233	0,0602	0,0002	0,02067669
0,7	0,0004	0,0207	0,0828	0,0211	0,0514	0,0002	0,02762828
0,8	0,0006	0,0171	0,1089	0,0202	0,0402	0,0001	0,03898829
0,9	0,001	0,0143	0,1374	0,0187	0,026	0,0001	0,05120394
1	0,0013	0,0124	0,1553	0,0181	0,0151	6E-05	0,06306198
1,1	0,0015	0,0113	0,1716	0,0168	0,0068	5E-05	0,07285216
1,2	0,0014	0,0109	0,1784	0,0162	0,0038	2E-05	0,07836996
1,3	0,0013	0,0108	0,1801	0,0158	0,0021	9E-06	0,08394535
1,4	0,0012	0,0108	0,1741	0,0147	0,0016	0	0,08628479
1,5	0,001	0,0112	0,1721	0,0149	0,0008	0	0,08936087
1,6	0,0008	0,0117	0,1655	0,0137	0,0002	0	0,09051939
1,8	0,0006	0,0123	0,1637	0,0138	0	0	0,09317296
2	0,0006	0,0125	0,1553	0,0129	0	0	0,09512206
2,5	0,0005	0,0125	0,1543	0,0128	0,0001	6E-06	0,10197964
4	0,0005	0,0129	0,1533	0,0129	0	1E-05	0,1104083
6	0,0003	0,0132	0,1539	0,013	0	9E-06	0,11671933

Таблица 4. Значения интенсивностей пиков масс, нормированные на интенсивность массового пика  $m/z = 40$ .

Для реагентов  $H_2$ ,  $CO$  и  $O_2$  мольная доля в каждой точке определялась путем нормировки полученной интенсивности сигнала у поверхности горелки (из табл. 3) на величину мольной доли соответствующего реагента в исходной смеси (из табл. 1):

$$X(h) = \frac{i(h)}{i(0)} \cdot X_0, \quad (1)$$

где  $i(h)$  - интенсивность сигнала на произвольной высоте  $h$  над горелкой,  $i(0)$  - интенсивность сигнала у поверхности горелки,  $X_0$  - мольная доля реагента в исходной смеси.

Мольная доля воды в продуктах горения определялась, исходя из баланса по водороду. Основным продуктом горения, содержащим водород, является вода, молекула которой содержит 2 атома водорода, кроме того, как видно из рис. 4, в зоне продуктов имеется известное количество молекулярного водорода, а в исходном топливе водород содержится только в виде молекул  $H_2$ . Исходя из того, что общее количество вещества практически неизменно по зоне пламени, можно вычислить количество моль воды в конечной зоне пламени, исходя из уравнения баланса по H:

$$X_{H_2}(0) = X_{H_2}(H) + X_{H_2O}(H), \quad (2)$$

где  $X_{H_2}(0)$  - мольная доля водорода у поверхности горелки,  $X_{H_2}(H)$  - мольная доля водорода в конечной зоне пламени,  $X_{H_2O}(H)$  - мольная доля воды в конечной зоне пламени.

Откуда мольная доля  $H_2O$  в зоне продуктов есть:

$$X_{H_2O}(H) = X_{H_2}(0) - X_{H_2} \quad (3)$$

В произвольной точке пламени мольная доля  $H_2O$  вычислялась по формуле:

$$X_{H_2O}(h) = \frac{i_{H_2O}(h) \cdot X_{H_2O}(H)}{i_{H_2O}(H)}, \quad (4)$$

где  $i_{H_2O}(h)$  - интенсивность сигнала в точке на высоте  $h$ ,  $X_{H_2O}(H)$  - мольная доля водорода в зоне продуктов,  $i_{H_2O}(H)$  - мольная доля воды в конечной зоне пламени.

Мольная доля  $CO_2$  в каждой точке определяется из баланса по углероду. Мольная доля  $CO$  в первой точке равна сумме мольных долей  $CO$  и  $CO_2$  в зоне продуктов горения. Уравнение баланса для C имеет следующий вид:

$$X_{CO}(0) = X_{CO}(H) + X_{CO_2}(H), \quad (5)$$

где  $X_{CO}(0)$  - мольная доля монооксида углерода у поверхности горелки,  $X_{CO}(H)$  - мольная доля монооксида углерода в конечной зоне пламени,  $X_{CO_2}(H)$  - мольная доля диоксида углерода в конечной зоне пламени.

Откуда можно определить мольную долю  $CO_2$  в зоне продуктов горения:

$$X_{CO_2}(H) = X_{CO}(0) - X_{CO}(H) \quad (6)$$

В произвольной точке пламени мольная доля  $H_2O$  вычислялась по формуле:

$$X_{CO_2}(h) = \frac{i_{CO_2}(h) \cdot X_{CO_2}(H)}{i_{CO_2}(H)}, \quad (7)$$

где  $i_{CO_2}(h)$  - интенсивность сигнала в каждой точке,  $X_{CO_2}(H)$  - мольная доля диоксида углерода в зоне продуктов,  $i_{CO_2}(H)$  - мольная доля диоксида углерода в конечной зоне пламени.

Мольные доли  $H$  и  $HO_2$  в каждой точке определяются методом отношения сечений ионизации. Сущность этого метода состоит в следующем. Нормированная интенсивность сигнала ( $I_i$ ), соответствующего  $i$ -му соединению при температуре  $T$ , связана с молярной долей ( $X_i$ ) этого соединения через калибровочный коэффициент ( $S_i$ ):

$$I_i = S_i(T) \cdot X_i \quad (8)$$

Калибровочный коэффициент можно представить в виде:

$$S_i(T) = A \sigma_i(E) \cdot F(T, p), \quad (9)$$

где  $A$  - константа,  $\sigma_i(E)$  - эффективное сечение ионизации  $i$ -ого соединения при энергии электронов  $E$ ,  $F(T, p)$  - эмпирическая функция, которая устанавливает зависимость плотности молекулярного пучка в области ионизации от давления в пламени  $p$  и локальной температуры  $T$ . Функция  $F(T, p)$  определяется геометрией и газодинамическими характеристиками системы пробоотбора (зонда и скиммера), поэтому она одинакова для всех частиц пробы. Из выражений (8) и (9) для двух соединений ( $i$ -ого и  $j$ -ого) можно получить соотношение:

$$\frac{I_i}{I_j} = \frac{\sigma_i(E_i)}{\sigma_j(E_j)} \cdot \frac{X_i}{X_j} \quad (10)$$

Зная интенсивности сигналов, соответствующие двум соединениям, а также молярную долю одного из этих соединений в определенной точке пламени, используя соотношение (10), можно вычислить мольную долю другого соединения в той же точке пламени. Мольная  $H$  вычислялась таким способом

относительно  $H_2$ , а  $HO_2$  - относительно  $O_2$ ). Эффективные сечения ионизации для большинства соединений при заданной энергии ионизирующих электронов были рассчитаны с использованием базы данных NIST (National Institute of Standards and Technology, USA) по сечениям ионизации электронным ударом. Сечения ионизации, взятые из базы данных, представлены в таблице 5.

	$CO_2$	$CO$	$H_2$	$H$	$O_2$	$HO_2$
<b>Сечение ионизации <math>\sigma</math>, <math>\text{\AA}^2</math></b>	0,13	0,069	0,074	0,165	0,102	0,385

Таблица 5. Сечения ионизации некоторых веществ из базы данных NIST

Зависимости мольных долей продуктов горения синтез-газа от высоты над горелкой, полученные в результате обработки экспериментальных данных представлены в таблице 6.

Расстояние от горелки, мм	Мольная доля, отн.ед.						
	$X_H$	$X_{H_2}$	$X_{H_2O}$	$X_{CO}$	$X_{O_2}$	$X_{HO_2}$	$X_{CO_2}$
0,1	0,0002	0,0551	0,0007	0,0551	0,0551	4,67913E-06	3E-06
0,2	0,0001	0,0505	0,0024	0,057	0,0544	3,93225E-05	0,0006
0,3	5E-05	0,0453	0,0045	0,0576	0,0526	5,49032E-05	0,0012
0,4	4E-05	0,0408	0,0068	0,0575	0,0508	3,866E-05	0,003
0,5	0,0001	0,0359	0,0108	0,0548	0,0476	4,79701E-05	0,0046
0,6	0,0002	0,0316	0,0155	0,0519	0,0443	4,52504E-05	0,0075
0,7	0,0003	0,027	0,0225	0,0471	0,0378	4,81282E-05	0,01
0,8	0,0004	0,0224	0,0296	0,045	0,0296	2,80017E-05	0,0141
0,9	0,0006	0,0188	0,0374	0,0418	0,0191	1,97335E-05	0,0185
1	0,0008	0,0162	0,0422	0,0403	0,0111	1,21891E-05	0,0227
1,1	0,0009	0,0147	0,0467	0,0375	0,005	1,07026E-05	0,0263
1,2	0,0008	0,0143	0,0485	0,0361	0,0028	4,35537E-06	0,0283
1,3	0,0008	0,0141	0,049	0,0352	0,0015	1,68159E-06	0,0303
1,4	0,0007	0,0142	0,0473	0,0328	0,0012	0	0,0311
1,5	0,0006	0,0146	0,0468	0,0332	0,0006	0	0,0322
1,6	0,0005	0,0153	0,045	0,0306	0,0002	0	0,0326
1,8	0,0004	0,0161	0,0445	0,0308	0	0	0,0336
2	0,0004	0,0163	0,0422	0,0287	0	0	0,0343
2,5	0,0003	0,0163	0,042	0,0286	9E-05	1,15784E-06	0,0368
4	0,0003	0,0169	0,0417	0,0289	0	2,38393E-06	0,0398
6	0,0002	0,0173	0,0419	0,029	0	1,82703E-06	0,0421

Таблица 6. Зависимости мольных долей продуктов горения синтез – газа от высоты над горелкой



На рисунках 6-7 представлены зависимости мольных долей продуктов горения синтез - газа, полученные по данным таблицы 6.

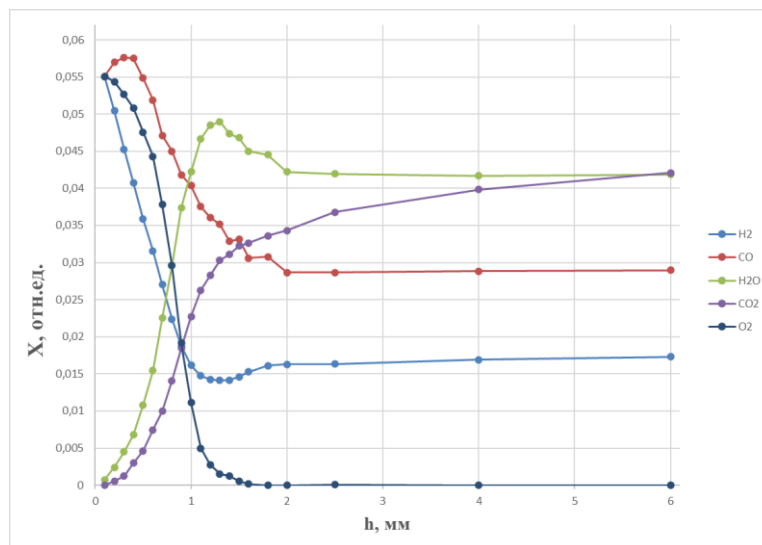


Рис. 6. Зависимости мольных долей (X) основных продуктов горения синтез – газа от высоты (h) над горелкой

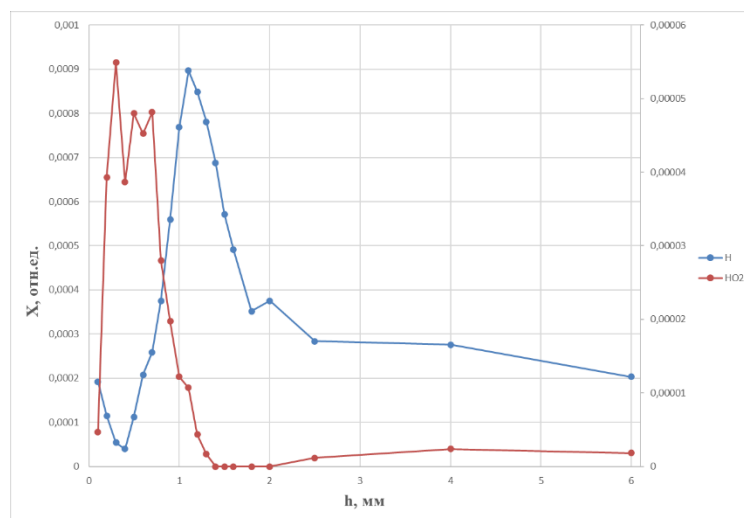


Рис.7. Зависимость мольных долей (X) промежуточных продуктов горения синтез – газа от высоты (h) над горелкой

## **Заключение**

В данной работе изучен принцип работы квадрупольного масс-спектрометра и метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии для исследования процессов горения. Используя данный метод, были измерены интенсивности пиков масс в пламени синтез-газа, на основе которых были получены зависимости мольных долей реагентов, основных и промежуточных продуктов горения ( $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{HO}_2$ ) в пламени смеси  $\text{H}_2/\text{CO}/\text{O}_2/\text{Ar}$  от высоты над горелкой.

## Список литературы

1. А.Т. Лебедев, Масс - спектрометрия в органической химии, М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2003. – 493 с. – С. 3 – 10.
2. Д. И. Писарев, О. О. Новиков, Д. А. Фадеева [и др.]. Масс-спектрометрия: история и перспективы использования, Молодой ученый, — 2012, — № 10 (45). — С. 99-104.
3. Н.А. Ключев, Е.С. Бродский, Современные методы масс-спектрометрического анализа органических соединений, Рос. хим. ж-л.- 2002,- Т. XLVI, № 4. – С. 57 – 63.
4. И.Е.Герасимов, Д. А. Князьков, С. А. Якимов, Т. А. Большова, А. Г. Шмаков<sup>1</sup>, О. П. Коробейничев, Влияние этанола на химию образования предшественников полиароматических углеводородов в богатом пламени этилена при атмосферном давлении, Том 48, Номер 6, 2012. – С. 5 - 7
5. N. Hansen, T.A. Cool, P.R. Westmoreland, K. Kohse-Höinghaus, Recent contributions of flame-sampling molecular-beam mass spectrometry to a fundamental understanding of combustion chemistry, Progress in Energy and Combustion Science, Volume 35, Issue 2, 2009. – P. 168-191.