تتشرف كلية الدراسات العليا و كلية الهندسة بدعوتكم لحضور

مناقشة رسالة الماجستير

العنوان

تحقيق حاسوبي في المعلمات الحرارية-السينتيكية التي تحكم تحلل المركبات النموذجية لزيت الحيوانات

للطالب

علي حسين محمد عمر الجفري

المشرف

د. محمد نور الطراونة

قسم الهندسة الكيميائية والبترول - كلية الهندسة

المكان والزمان

6 مايو 2024

1:00

F3-40

الملخص

من بين المنتجات الملحوظة المستحصلة عن تحلل الحراري للكتلة الحيوية هي المركبات العطرية البسيطة التي تحتوي على الأكسجين. تظهر هذه المركبات عادة بأحمال عالية في الزيوت الحيوية المستخلصة من الكتلة الحيوية. وبالتالي، من المهم فهم الكيمياء التحللية لهذه الفئة من المركبات. يتناول هذا الأطروحة نهجًا عامًا لتقديم المعلمات الحرارية السينيمائية التي تحكم تحلل مجموعة مختارة من المركبات النموذجية للزيوت الحيوية في نظامين متميزين؛ أولاً مسارات مشتقة من الراديكالات في الطور الغازي، وثانيًا تحلل حراري في وسطها المكثف. يتم تحقيق الجزء الأول من خلال حسابات وظيفية دقيقة للكثافة في حين يتم تحقيق الجزء الثاني من خلال استخدام النماذج الخالية من النموذج والمناسبة لتحليل منحنيات فقدان الكتلة المحقونة في التحليل الحراري الوزني. في الجزء الأول من الأطروحة، استكشفنا تفاعلات الراديكال هيدروبروكسيل (HO2) مع الأنيسول، والكريزول، والجواياكول، وفانيلين مع الهدف الأساسي من تقييم دقة النماذج الحركية الموجودة في الأدبيات في توقع وقت تأخير الاشتعال؛ وهو خصم مهم لوقود الاحتراق. استخدام المعلمات الحركية المحدثة لتفاعلات الاستخلاص الأولي للهيدروجين بواسطة HO2 من هذه المركبات النموذجية للزيوت الحيوية لم يؤثر إلا قليلاً على أوقات تأخير الاشتعال مع مراعاة ضغوط التشغيل المختلفة. على نفس الخط، وجدنا أن التحلل المشتق من الراديكالات للكريزول والجواياكول يحدث بشكل رئيسي من خلال استخلاص الهيدروكسيل مع إسهام ملحوظ في الاستخلاص من موقع الميثيل. في حالة الفانيلين، يفترض أن الاستخلاص من الميثيل والهيدروكسيل يحظى بأهمية مقارنة. قمنا بحساب طاقات فك الروابط في هذه المركبات لتحديد المواقع القابلة للاستخلاص المفضلة. تم توفير معلمات أرينيوس لمجموعة كبيرة من التفاعلات. من المتوقع أن تعزز مثل هذه النتائج دقة وقابلية التنبؤ لنماذج الحركة التي تأخذ في الاعتبار التحلل التأكسدي والبيروليتي للمركبات البديلة للكتلة الحيوية. في تحقيق الهدف الثاني للأطروحة وبناءً على ملامح TGA و DTG المحصل عليها، تم استخدام الأساليب الخالية من النموذج، وتحديدًا نموذج KAS، ونموذج FWO، ونموذج Starink لاستخلاص المعلمات الحرارية السينيمائية للتحلل التأكسدي والبيروليتي للكاتيكول والمالتول. تم تحديد آليات التحلل بعد ذلك باستخدام طريقة كوتس وريدفيرن لتناسب الحركة الديناميكية. يأمل أن تسهم نتائج هذا العمل في تعزيز فهمنا للتفاعلات الكيميائية المعقدة التي تسود أثناء تحلل المركبات النموذجية للزيوت الحيوية.

مفاهيم البحث الرئيسية: مركبات نموذجية لزيت الحيوانات، تقريب الكثافة الوظيفية (DFT)، الراديكالات، تحليل الوزن الحراري (TGA)، معلمات أرينيوس، الآليات، الحركية، الراديكالات.