

ՀԱՍՏԱՏՈՒՄ ԵՄ

ՀՀ ԳԱԱ Մ.Գ. Մանվելյանի անվան Ընդհանուր և
անօրգանական քիմիայի ինստիտուտի անօրեն, տ.գ.թ.

Կ.Գ. Գրիգորյան

« 22 » նոյեմբերի 2023թ



Կ Ա Ր Ծ Ի Ք

ԱՌԱՋԱՏԱՐ ԿԱԶՄԱԿԵՐՊՈՒԹՅԱՆ

Հասմիկ Արզումանի Հարությունյանի «SO₂-ի առկայությամբ ջրածնաթթվածնային խառնուրդի ցածրջերմաստիճանային բոցերի առանձնահատկությունները» ատենախոսության վերաբերյալ՝ ներկայացված Բ.00.04 Ֆիզիկական քիմիա մասնագիտությամբ քիմիական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման համար, մասնագիտական խորհրդում ներկայացնելու նպատակով:

Քննարկումը կատարվել է Հայաստանի Հանրապետության Գիտությունների Ազգային Ակադեմիայի Մ.Գ. Մանվելյանի անվան Ընդհանուր և անօրգանական քիմիայի ինստիտուտի գիտական խորհրդի 2023թ. նոյեմբերի 21-ի նիստում (արձանագրություն թիվ 13):

Քննարկմանը ներկա էին ինստիտուտի գիտական խորհրդի ներքոհիշյալ անդամները՝ խորհրդի նախագահ, տ.գ.թ. Կ.Գ. Գրիգորյանը, ինստիտուտի փոխտնօրեն, տ.գ.դ., պրոֆեսոր Ն.Բ. Կնյազյանը, գիտ.քարտուղար տ.գ.թ. Գ.Գ. Մանուկյանը, լաբ.վարիչներ՝ ք.գ.դ., պրոֆեսոր Ն.Հ. Զուլումյանը, տ.գ.թ. Ա.Կ. Կոստանյանը, տ.գ.թ. Վ.Վ. Բաղրամյանը, տ.գ.թ. Ն.Վ. Գուրգենյանը, տ.գ.դ. Կ.Գ. Դավիթյանը, ք.գ.թ. Հ.Ա. Բեզլարյանը, ք.գ.թ. Է.Ք. Հայրիյանը, արաջ.գիտ. աշխատողներ՝ ք.գ.թ. Ա.Ա. Սարգսյանը, տ.գ.թ. Ա.Ռ. Իսահակյանը և ուրիշներ:

Լսեցին՝ ՀՀ ԳԱԱ Ա.Բ. Նալբանդյանի անվան Քիմիական ֆիզիկայի ինստիտուտի հայցորդ Հասմիկ Արզումանի Հարությունյանի կողմից ներկայացված «SO₂-ի

առկայությամբ ջրածնաթթվածնային խառնուրդի ցածր ջերմաստիճանային բոցերի առանձնահատկությունները» զեկուցումը «Ֆիզիկական քիմիա» մասնագիտությամբ (դասիչ Բ.00.04) քիմիական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման համար:

Հարցեր տվեցին՝ Ն.Բ. Կնյազյանը, Ա.Ա. Սարգսյանը, Ա.Կ. Կոստանյանը, Ն.Վ. Գուրգենյանը, Մ.Ա.Պողոսյանը, Հ.Ա. Բեզլարյանը, որոնց հայցորդ Հասմիկ Հարությունյանը տվեց սպառիչ և բավարար պատասխան:

Ելույթ ունեցան՝ պրոֆեսոր Ն.Բ. Կնյազյանը, Վ.Վ.Բաղրամյանը, Ա.Ա. Սարգսյանը, ովքեր նշելով թեմայի արդիականությունը և կարևորությունը, դրական գնահատեցին կատարված աշխատանքը և առաջարկեցին տալ դրական կարծիք՝ երաշխավորելով այն պաշտպանության Բ.00.04 «Ֆիզիկական քիմիա» մասնագիտությամբ քիմիական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման համար:

Քվեարկությունը կայացել է բաց: Քիմիական թեկնածուի աստիճանաշնորհման համար դրական երաշխավորման առաջարկությունն ընդունվել է միաձայն՝ դեմ և ձեռնպահ չեն եղել:

Ատենախոսության արդիականությունը և հրատապությունը

Ջերմային էներգիա ստանալու նպատակով այժմ հիմնականում օգտագործվում են ինչպես բնական ածխաջրածնային հումքի, այպես էլ ածխի այրման գործընթացները: Բնական գազը, նավթը և ածուխը այրելիս դրանցում պարունակվող ծծումբն օքսիդանում է՝ առաջացնելով հիմնականում երկու միացություն՝ ծծմբի երկօքսիդ (SO_2 , ծծմբային գազ) և ծծմբի եռօքսիդ (SO_3 , ծծմբական անհիդրիդ): Ծծումբը և նրա միացություններն առկա են բնական գազում, նավթում, ածխում: Ծծմբի երկօքսիդը առկա է նաև մետալուրգիական արտանետումներում: Այն կարող է առաջացնել շնչառական տարբեր հիվանդություններ, հանգեցնում է հողի թթվայնացման, կենդանիների և բույսերի թունավորման՝ զգալի վնաս պատճառելով շրջակա միջավայրին:

Ծծմբական անհիդրիդը հեշտությամբ ուտիլզացվում է, քանի որ այն ջրի մեջ կլանվում է և վեր է ածվում ծծմբական թթվի: Սակայն SO₂-ը չունի նմանատիպ հատկություն, և նրա ուտիլզացումը ավելի բարդ խնդիր է: Հետևաբար տարբեր արտադրությունների կողմից արտանետվող ծծմբական գազի վնասազերծումը և փոխակերպման եղանակների որոնումը անվտանգ միացությունների ստացմամբ հանդիսանում է արդիական խնդիր:

Ատենախոսության նպատակը և ծավալը

Աշխատանքում նպատակ է դրվել ուսումնասիրել SO₂-ի ազդեցությունը ջրածին-թթվածին շղթայական ռեակցիայի վրա, ցածրջերմաստիճանային ռեժիմում, որի ընթացքում SO₂-ը փոխակերպվում է ծծմբի և հետագոտել այդ փոխարկման մեխանիզմը, ծծմբի քիմիական և ֆիզիկական հատկությունները.

- Հետագոտվել են SO₂-ի փոխարկման առանձնահատկությունները ջրածին-թթվածին օքսիդացման ռեակցիայում՝ ստատիկ և դինամիկ պայմաններում;
- Ջրածին - թթվածին - ծծմբի երկօքսիդ խառնուրդների ռեակցիաների առանձնահատկությունների կախվածությունը ճնշումից, ջերմաստիճանից, ռեագենտների կոնցենտրացիաներից և այլն:
- Թվային մոդելավորման մեթոդով իրականացնվել է հետագոտված քիմիական ռեակցիայի մեխանիզմի կինետիկական վերլուծությունը:
- Բացահայտվել են ուղիներ SO₂-ի օգտահանման համար, որպես վերջնական արդյունք՝ տարրական ծծմբի փոխակերպման նպատակով:

Ատենախոսությունը բաղկացած է ներածությունից, 4 գլխից՝ գրական ակնարկից, փորձի մեթոդաբանությունից (ցածր ջերմաստիճանային բոցերի առանձնահատկությունների փորձարարական եղանակով ուսումնասիրությունից), զուգորդված գործընթացի մաթեմատիկական մոդելավորումից (ծծմբի առաջացման մեխանիզմի ուսումնասիրությունը), եզրակացություններից և օգտագործված գրականության ցանկից: Աշխատանքը շարադրված է 113 էջում, պարունակում է 34 նկար, 6 աղյուսակ և 124 գրական հղում:

Գիտական նորույթը և գործնական նշանակությունը

Բացահայտված է, որ ծծմբի երկօքսիդի փոխակերպումն իրականանում է զուգորդված պրոցեսով, որն ընթանում է ջրածնի օքսիդացման ճյուղավորված շղթայական ռեակցիայով:

- Պարզված է, որ ցածրջերմաստիճանային և ճնշման պայմաններում ջրածնի օքսիդացման շղթայական ռեակցիայում առաջանում են H₂O[•] ատոմներ և OH ազատ ռադիկալներ, որոնք զուգորդված պրոցեսում SO₂ փոխակերպում են S[•] ատոմային ծծմբի:

- Պարզված է, որ ի տարբերություն բարձր ջերմաստիճանային տիրույթի, ընդհատվող բոցային ռեժիմում SO₂-ի հավելումները ջրածնի ցածրջերմաստիճանային այրման ժամանակ չեն ունենում արգելակող ազդեցություն, այլ արագացնում են ռադիկալային շղթայական պրոցեսը:

- Ստացված արդյունքները հնարավորություն են տալիս ավելի խորը ընկալել ջրածնի օքսիդացման շղթայական ռեակցիայի ազդեցությամբ անօրգանական միացությունների, մասնավորապես՝ ծծմբի երկօքսիդի քիմիական փոխակերպման գործընթացների մեխանիզմը և այս գիտական հիմքով մոտենալ բնապահպանական խնդիրների լուծմանը:

- Ծծմբի երկօքսիդի ավելացմամբ ջրածնի օքսիդացման շղթայական ռեակցիայի ուսումնասիրությունից ստացված տվյալները կարող են գործնական կիրառություն ունենալ ջերմային էլեկտրակայաններից և մետաղագործական գործարաններից ջերմային արտանետումների ժամանակ ծծմբի երկօքսիդի օգտահանման համար:

- Ստացված արդյունքները կարող են օգտակար լինել SO₂-ի առկայությամբ ածխաջրածինների, մասնավորապես մեթանի նպատակային այրման գործընթացի օպտիմալացման համար:

Ներկայացված աշխատանքում բացահայտված է, որ ջրածնաթթվածնային խառնուրդների ցածր ջերմաստիճանային նոսրացված բոցերի ռեժիմում SO₂-ի հավելումը ենթարկվում է վերականգնման՝ տարրական ծծմբի գոյացմամբ:

Արդյունքների նշանակությունը գիտության և արտադրության ոլորտներում

- Գիտական հետազոտությունների արդյունքները հիմնված են ծծմբի երկօքսիդի փոխակերպման զուգորդված գործընթացի իրականացման վրա, որն ընթանում է ջրածնի օքսիդացման ճյուղավորված շղթայական ռեակցիայով:
- Ցույց է տրված, որ ցածրջերմաստիճանային և ճնշման պայմաններում ջրածնի օքսիդացման շղթայական ռեակցիայում առաջանում են H₂O-ատոմները և OH ազատ ռադիկալներ, որոնք զուգորդված պրոցեսում SO₂-ը փոխակերպում են S-ատոմային ծծմբի:
- Ի տարբերություն բարձր ջերմաստիճանային տիրույթի, ընդհատվող բոցային ռեժիմում SO₂-ի հավելումները ջրածնի ցածրջերմաստիճանային այրման ժամանակ չեն ունենում արգելակող ազդեցություն, այլ արագացնում են ռադիկալային շղթայական պրոցեսը:

Ծծմբի երկօքսիդի ավելացմամբ ջրածնի օքսիդացման շղթայական ռեակցիայի ուսումնասիրությունից ստացված տվյալները կարող են գործնական կիրառություն ունենալ ջերմային էլեկտրակայաններից և մետաղագործական գործարաններից ջերմային արտանետումների ժամանակ ծծմբի երկօքսիդի օգտահանման համար:

Ստացված արդյունքները կարող են օգտակար լինել SO₂-ի առկայությամբ ածխաջրածինների, մասնավորապես մեթանի նպատակային այրման գործընթացի օպտիմալացման համար:

Աշխատանքի գործնական կարևորությունը

Կատարված համալիր հետազոտությունների արդյունքների հիման վրա առաջին անգամ կիրառվել է գործընթացի ժամանակային միջակայքի բացման մեթոդն ինչպես փորձարարական, այնպես էլ թվային մոդելավորման եղանակով, որը

կարող է օգտագործվել պայթուկային գործընթացների համար, որոնք տեղի են ունենում բարձր արագությամբ, կարճ ժամանակային ընդմիջումներով:

Ստացված արդյունքների և եզրակացությունների նորությունը

Հայցորդի կողմից առաջին անգամ ցույց է տրվել, որ, ի տարբերություն գրականության տվյալների, ծծմբի երկօքսիդը կարող է ոչ միայն դանդաղեցնել, այլև արագացնել թթվածնով ջրածնի օքսիդացման գործընթացը: Ծծմբի երկօքսիդի առկայության դեպքում ջրածին-թթվածին օքսիդացման շղթայական ռեակցիան կարող է անցնել տատանողական ռեժիմի:

Ուսումնասիրված պայմաններում ծծումբ պարունակող այնպիսի միացություններ, ինչպիսիք են H_2S -ը և SO_3 -ը, չեն առաջանում:

Պրոցեսի ընթացքում առաջացած տարրական ծծումբն ունի բարձր քիմիական ակտիվություն: Մասնավորապես, ծծմբի նստեցման ժամանակ՝ ռեակտորից դուրս գալուց հետո, տեղի է ունենում փոխազդեցություն այլումինե թիթեղի սառը և պինդ մակերեսի հետ :

Ելնելով ստացված փորձարարական տվյալներից և մաթեմատիկական թվային մոդելավորման անալիզից հաստատվել է, որ դիտարկվող ազդեցությունները պայմանավորված են ակտիվ կենտրոններով (այդ թվում ծծումբ պարունակող), որոնք առաջանում են ջրածնի և ծծմբի երկօքսիդի զուգորդված օքսիդացումով:

Օգտագործելով թվային մոդելավորման մեթոդը ցույց է տրվել, որ ծծմբի երկօքսիդի արագացնող ազդեցությունը ջրածնի օքսիդացման գործընթացի վրա պայմանավորված է նրանով, որ փոխակերպման ընթացքում առաջացող ծծմբի ատոմները փոխազդեցության մեջ են մտնում ատոմների և ռադիկալների հետ՝ ազդելով գործընթացի զարգացման վրա:

Աշխատանքի վերաբերյալ հարկ է նշել հետևյալ դիտողությունները

1, Գտնում ենք, որ անհրաժեշտ էր աշխատանքում ներկայացվելին զուգահեռ ընթացող երեք փոխակուսումնառնությունների կոնցենտրացիաների

տատանումների սահմանները, որոնք կարող են հանդիսանալ ռեակցիաների խզման պատճառ:

2, Նշվում է, որ ռեակտորից դուրս եկող ծծումբի և սառը այլումինի թիթեղի միջև ընթանում է քիմիական փոխազդեցություն: Հայտի է, որ այլումինի մակերեսին առաջանում է օքսիդի շերտ, որն ունի ցածր ռեակցիոն ակտիվություն: Հավանաբար նշածը կապված է այլ երևույթի հետ:

3, Ելային խառնուրդում CO₂-ի փոխարինումի N₂- ով չի մեկնաբանված:

Նշված թերությունները չեն նվազեցնում գրախոսվող աշխատանքի գիտական արժանիքները, այլ դրանք միայն ցանկություններ են հեղինակի հետագա գիտական աշխատանքներում իրականացնելու համար:

Ամփոփելով արդյունքները, կարելի է եզրակացնել, որ կատարվել է տեսական և կիրառական նշանակություն ունեցող գիտահետազոտական ավարտուն աշխատանք, որի տվյալները կարող են կիրառվել ջերմային էլեկտրակայաններից և մետաղագործական գործարաններից ջերմային արտանետումների ժամանակ ծծմբի երկօքսիդի օգտահանման համար:

Ստացված արդյունքները կարող են օգտակար լինել SO₂-ի առկայությամբ ածխաջրածինների, մասնավորապես մեթանի նպատակային այրման գործընթացի օպտիմալացման համար:

Ամփոփելով պետք է նշել, որ Հասմիկ Արզումանի Հարությունյանի կողմից կատարված է ծավալուն գիտահետազոտական աշխատանքներ, որոնց արդյունքները նորույթ են քիմիական ֆիզիկայի ոլորտում, գիտական մեկնաբանությունները, վերլուծությունները և եզրակացությունները միմյանց չեն հակասում; : Պաշտպանության ներկայացված ատենախոսությունն իր կողմից կատարված գիտափորձերի և հետազոտությունների ընդհանուր շարադրանքն է: Ատենախոսության հիմնական արդյունքները հրատարակված են 13 գիտական աշխատանքում՝ 4 հոդված տեղական գրախոսվող ամսագրերում, իսկ 4-ը՝ Scopus և Web of Science Group- ում գրանցված միջազգային ամսագրերում: Ատենախոսության

արդյունքները ներկայացվել են տեղական և միջազգային գիտաժողովներում՝ 5
թեզիս:

Աշխատանքն կատարված է ՀՀ ԲՈԿ-ի պահանջներին համապատասխան, քավարարում է 6, 7, 10, 11 և 13 կետերի պահանջներին և իրենից ներկայացնում է տեսական և կիրառական կարևոր խնդրի լուծումն ապահովող, գիտականորեն հիմնավորված և ավարտուն աշխատանք, իսկ ատենախոսության հեղինակը՝ Հասմիկ Արզումանի Հարությունյանը արժանի է «Ֆիզիկական քիմիա» (դասիչ Բ.00.04) մասնագիտությամբ քիմիական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի շնորհմանը:

ՀՀ ԳԱԱ Մ.Գ. Մանվելյանի անվան ընդհանուր և
անօրգանական քիմիայի ինստիտուտի
փոխտնօրեն, տեխ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր

Մ.Բ. Կնյազյան

ՀՀ ԳԱԱ Մ.Գ. Մանվելյանի անվան ընդհանուր և
անօրգանական քիմիայի ինստիտուտի
գիտ. քարտուղար, տեխ. գիտ. թեկնածու

Գ.Գ. Մանուկյան

