



ACADEMIA ROMÂNĂ
SCOSAAR

REZUMATUL TEZEI DE ABILITARE

TITLUL: Comportamentul exploziv al amestecurilor inflamabile

Domeniul de abilitare: Chimie

Autor: dr. Mîțu Maria

Teza de abilitare intitulată “Comportamentul exploziv al amestecurilor inflamabile” prezintă principalele rezultate științifice și profesionale relevante ale candidatei după finalizarea studiilor doctorale și obținerea diplomei de doctor în domeniul Chimie de la Universitatea din București, Facultatea de Chimie, în anul 2004.

Teza de abilitare este structurată în trei părți principale: Secțiunea I - Realizări științifice, academice și profesionale, Secțiunea II - Planuri de dezvoltare a carierei academice, profesionale și de cercetare, urmată de Referințe. În prima secțiune sunt prezentate cele mai importante rezultate științifice și contribuții originale susținute de cele 10 articole ISI reprezentative din ultimii 10 ani (publicate în reviste din quartilele Q1 și Q2, conform Web of Science) în calitate de autor principal. Principalele realizări academice și profesionale sunt prezentate în prima parte a secțiunii a II-a, iar planurile de dezvoltare a carierei sunt prezentate în ultima parte a celei de a doua secțiuni. Cercetarea științifică vizează analiza exploziilor în regim de deflagrație a amestecurilor combustibil-oxidant, combustibil-oxidant-inert în fază gazoasă, aflate în diferite condiții inițiale controlate.



ACADEMIA ROMÂNĂ SCOSAAR

Secțiunea I cuprinde 4 subcapitole în care sunt descrise direcțiile activității științifice abordate:

- ✓ Domeniile de explozivitate și concentrațiile limită de oxigen ale amestecurilor formate din compuși combustibili oxigenați - aer - gaze inerte (Subcapitolul I.1);
- ✓ Studii privind influența gazului inert asupra MESG (spațiul maxim de siguranță) a amestecurilor combustibil-aer la diverse presiuni inițiale (Subcapitolul I.2);
- ✓ Influența condițiilor inițiale (concentrație, presiune, temperatură, volumul vasului de explozie, diluanți) asupra parametrilor de propagare a amestecurilor de alcooli inferiori/aer (Subcapitolul I.3);
- ✓ Studii privind influența gazului oxidant asupra propagării flăcărilor de metan diluate cu gaz inert (Subcapitolul I.4).

Prima direcție de cercetare (subcapitolul I.1) s-a concentrat pe determinarea experimentală și teoretică a domeniului de explozivitate și a concentrației limită de oxigen pentru amestecurile: metil propionat/aer/inert, metil acetat/aer/inert și dimetil carbonat/aer/inert (gaze inerte: azot, heliu, și dioxid de carbon), la presiune ambiantă și temperatura inițială 423 K. De asemenea, s-au determinat domeniile de explozivitate și concentrațiile limită de oxigen pentru amestecurile combustibil/aer/inert (inert: azot și dioxid de carbon) pentru o serie de alcooli (metanol, etanol, 1-propanol, 2-propanol, 1-butanol, terț-butanol, 1-butoxi-2-propanol, 1-hexanol, ciclohexanol, etandiol) și de cetone (acetona, 2-butanonă, 2-pentanonă, 3-pentanonă, ciclopentanonă, ciclohexanonă). Experimentele au fost realizate în condiții de presiune ambiantă și temperaturi inițiale corespunzătoare procesului de evaporare a substanțelor lichide în vederea obținerii de amestecuri omogene pentru determinările experimentale. Rezultate obținute aduc un grad semnificativ de noutate referitor la comportamentul exploziv al acestor amestecuri inflamabile. Adăugarea unui gaz inert poate împiedica în mod eficient un amestec de combustibil/aer să atingă niveluri de concentrație explozive, iar metoda de inertizare poate fi utilizată în instalațiile industriale pentru a menține condiții de funcționare sigure. Din acest motiv de siguranță, concentrația de oxigen din amestec poate fi monitorizată. Amestecul va rămâne neinflamabil, indiferent de cantitatea de combustibil adăugată, atâta timp cât conținutul de oxigen rămâne sub concentrația limită de oxigen.

A doua direcție de cercetare (subcapitolul I.2) prezintă rezultate noi privind influența



ACADEMIA ROMÂNĂ SCOSAAR

gazului inert asupra spațiului maxim de siguranță al amestecurilor combustibil/aer/inert în condiții inițiale variate de presiune și concentrație (combustibil: hidrogen, metan, etenă, propan; inert: argon, azot sau dioxid de carbon). Spațiul maxim de siguranță reprezintă mărimea critică prin care se examinează posibilitatea aprinderii cu jeturi de gaze fierbinți (MESG sau "maximum experimental safe gap", conform denumirii acceptate internațional). De obicei, spațiul maxim de siguranță se măsoară în condiții inițiale atmosferice (MESG), însă acest parametru este necesar a fi studiat și la presiuni și/sau temperaturi diferite de cele ambiante (S_G), pentru care sunt de obicei necesare măsuri de evitare a exploziilor. Spațiului maxim de siguranță (MESG) este un parametru important pentru clasificarea gazelor inflamabile și în proiectarea echipamentelor rezistente la explozie, precum ar fi opritoarele de flăcări, deoarece descrie capacitatea unei substanțe de a preveni transmiterea flăcării.

Scopul principal al celei de a treia direcții de cercetare (subcapitolul I.3) a fost acela de a caracteriza parametrii de propagare (presiunea de explozie, timpul la care se atinge presiunea de explozie, viteza de creștere a presiunii, factorul de severitate și viteza normală de combustie) a amestecurilor metanol-aer, etanol-aer și etanol-aer-diluant în vase închise, în condiții inițiale variate (concentrație, presiune, temperatură, volumul vasului de explozie). Parametrii de propagare caracteristici proceselor de explozie a amestecurilor inflamabile în incinte închise stau la baza protecției și prevenirii exploziilor. Această direcție de cercetare s-a dezvoltat datorită interesului deosebit acordat alcoolilor inferiori, precum metanolul și etanolul, ca potențiali combustibili regenerabili. Metanolul se remarcă prin avantajele sale ecologice și costurile reduse, iar etanolul ca fiind cel mai utilizat biocombustibil fie ca aditiv, fie ca combustibil pentru motoarele pe benzină.

A patra direcție de cercetare (subcapitolul I.4) a abordat studiul privind influența gazului oxidant (aer sau protoxid de azot) asupra propagării flăcărilor de metan diluate cu gaz inert (amestecuri metan-aer, metan-aer-inert și metan- N_2O -inert). S-au obținut valori cu grad de noutate ale vitezelor normale de combustie pentru amestecurile CH_4 /oxidant/inert determinate experimental din înregistrările presiune-timp obținute într-o celulă sferică cu aprindere centrală folosind o corelație bazată pe legea cubică a creșterii presiunii, și teoretic prin modelare numerică. Alături de aceasta, modelarea chimică a propagării flăcării în amestecuri reactive a oferit profile de temperatură și specii chimice în flacără, viteze de eliberare a căldurii,



ACADEMIA ROMÂNĂ SCOSAAR

determinate în condiții variabile de presiune și concentrație. Viteza normală de combustie este o proprietate fundamentală a amestecurilor gazoase inflamabile, caracterizând reactivitatea combustibilului în prezența unui oxidant. Acest parametru este extrem de util pentru o gamă largă de aplicații precum dimensionarea reactoarelor în care se pot forma amestecuri explozive, dimensionarea supapelor de evacuare, construirea opritoarelor de flacără.

Secțiunea a II-a prezintă principalele realizări profesionale, academice și științifice după obținerea titlului de doctor în Chimie. Rezultatele obținute în urma activității de cercetare a dr. Maria Mîțu s-au concretizat în publicarea a 81 de articole în reviste ISI (45 ca autor principal), 8 articole non-ISI, 12 lucrări publicate în Proceedings la diferite conferințe și simpozioane de specialitate, a 70 comunicări științifice și a 2 seminarii susținute în străinătate. Dr. Maria Mîțu a fost responsabil al proiectului de cercetare „Dinamica reacțiilor rapide de oxidare și descompunere în sisteme omogene” din planul intern al Institutului de Chimie Fizică - Ilie Murgulescu (2020-2024), responsabil a 5 teme de cercetare din planul intern al Institutului de Chimie Fizică - Ilie Murgulescu (2020 - 2024) și colaborator la 11 granturi de cercetare și un program național de cercetare (la Institutul de Chimie Fizică - Ilie Murgulescu; Facultatea de Chimie - Universitatea din București), la 5 proiecte de cercetare și 16 teme de cercetare în cadrul stagiilor de cercetare din străinătate (la Physikalische-Technische Bundesanstalt, Braunschweig, Germania). Alături de acestea, Maria Mîțu a fost responsabil a două acorduri internaționale de cooperare științifică (2020-2024).

De asemenea, secțiunea a II-a prezintă planurile de dezvoltare a carierei. Direcțiile de cercetare științifică descrise anterior cu rezultate semnificative vor fi luate în considerare pentru viitor, împreună cu dezvoltarea unor direcții noi de cercetare care vor aduce rezultate importante și inovatoare, precum și exinderea domeniului de cercetare.

Ultima parte a tezei de abilitare conține referințele bibliografice corespunzătoare conținutului primei secțiuni.