

ДЕТАЛЬНЫЙ КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ОКИСЛЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ИЗОПЕНТАНА И ИЗОГЕКСАНА

В. Я. Басевич¹, А. А. Беляев², С. Н. Медведев³, В. С. Посвянский⁴, С. М. Фролов⁵

Аннотация: Целью работы являлось построение детального кинетического механизма (ДКМ) окисления и горения изопентана (2-метилбутана) и изогексана (2-метилпентана), описывающего как высокотемпературные реакции, так и многостадийный процесс в области низких температур. Эти углеводороды выбраны потому, что они являются, вместе с изобутаном, первыми в гомологическом ряду изомеризованных алканов, для более высокого члена которого — изооктана (2,2,4-триметилпентана) — в экспериментах наблюдалось многостадийное самовоспламенение. Предположительно они являются важными промежуточными продуктами при окислении изооктана. При определенных условиях процесс многостадийного самовоспламенения названных углеводородов обнаруживает, как это характерно для нормальных алканов, три последовательные стадии — холодное, голубое и горячее пламена. По предложенному механизму выполнены расчеты самовоспламенения и распространения пламени, проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными. Получено удовлетворительное качественное и количественное согласие.

Ключевые слова: изопентан; изогексан; кинетические механизмы; самовоспламенение; многостадийность; распространение пламени

Литература

1. Соколик А. С. Самовоспламенение, пламя и детонация в газах. — М.: Изд-во АН СССР, 1960. 427 с.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки России по государственному контракту № 14.609.21.0001 (идентификатор контракта RFMEFI57914X0038) «Разработка технологии создания гидрореактивной тяги в водометных двигателях высокоскоростных водных транспортных средств и создание стендового демонстрационного образца гидрореактивного импульсно-детонационного двигателя» в рамках Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 годы», а также при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 15-08-00782) и Российского научного фонда (проект 14-13-00082). Файл с данными кинетического механизма будет размещен на сайте www.combex.ru.

¹Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

²Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevINF@yandex.ru

³Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, medvedevs@chph.ras.ru

⁴Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vsposv@chph.ras.ru

⁵Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

2. *Downs D., Street J. S., Wheeler R. W.* Cool flame formation in a motored engine // *Fuel*, 1953. Vol. 32. P. 279–295.
3. *Burcat A., Olchanski E., Sokolinski C.* 2-Methyl-pentane ignition kinetics in a shock tube // *Combust. Sci. Technol.*, 1999. Vol. 147. P. 1–37.
4. *Oehlschlaeger M. A., Davidson D. F., Herbon J. T., Hanson R. K.* Shock tube measurements of branched alkane ignition times and OH concentration time histories // *Int. J. Chem. Kin.*, 2004. Vol. 36. No. 2. P. 67–78.
5. *Machrafi H., Cavadias S.* Three-stage autoignition of gasoline in an HCCI engine: An experimental and chemical kinetic modeling investigation // *Combust. Flame*, 2008. Vol. 155. No. 4. P. 557–570.
6. *Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М.* Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C₁–C₁₀ к C₁₁–C₁₆ // *Хим. физика*, 2013. Vol. 32. No. 4. P. 87–96.
7. *Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов С. М.* Детальный кинетический механизм многостадийного окисления и горения изобутана // *Хим. физика*, 2015. Т. 34. № 4. С. 47–54.
8. *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей. — Л.: Изд-во Химия, 1982. 592 с.
9. *Беляев А. А., Посвянский В. С.* Нормальная скорость распространения ламинарного пламени // *Алгоритмы и программы. Информ. бюлл. Гос. фонда алгоритмов и программ СССР*, 1985. Т. 3. № 66. С. 35.
10. *Gerstein M., Levine O., Wong E. L.* Flame propagation. II. The determination of fundamental burning velocities of hydrocarbons by a revised tube method // *J. Am. Chem. Soc.*, 1951. Vol. 73. No. 1. P. 418–422.
11. *Gibbs G. I., Calcote H. F.* Effect of molecular structure on burning velocity // *J. Chem. Eng. Data*, 1959. Vol. 4. No. 3. P. 226–237.
12. *Farrell J. T., Johnston R. J., Androulakis I. P.* Molecular structure effects on laminar burning velocities at elevated temperature and pressure. SAE Paper No. 2004-01-2936, 2004. 22 p.
13. *Halsted M. P., Pye D. B., Quinn C. P.* Laminar burning velocities and weak flammability limits under engine-like conditions // *Combust. Flame*, 1974. Vol. 22. No. 1. P. 89–97.

Поступила в редакцию 01.11.14