

КИНЕТИКА ПИРОЛИЗА И САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ АЦЕТОНА ЗА ОТРАЖЕННЫМИ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ: ЭКСПЕРИМЕНТ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ*

А. М. Тереза¹, Г. Л. Агафонов², С. П. Медведев³, Н. В. Назарова⁴, В. Н. Смирнов⁵

Аннотация: Проведено экспериментальное исследование самовоспламенения смеси 0,5% $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$ + + 2% O_2 + Ar за отраженными ударными волнами. Кинетика процесса изучалась с помощью регистрации поглощения радикалов CH_3 ($\lambda = 216$ нм) и эмиссии OH^* ($\lambda = 308$ нм). Диапазон температуры составил 1280–1720 К при общей концентрации смеси $[M_{50}] \approx 10^{-5}$ моль/см³. С помощью различных детальных кинетических механизмов (ДКМ) проведено численное моделирование. Определены основные каналы, влияющие на пиролиз ацетона и самовоспламенение смесей ацетона с кислородом. Показано, что, несмотря на значительные отличия при описании профилей CH_3 , различные ДКМ хорошо описывают временную зависимость задержки воспламенения.

Ключевые слова: кинетика воспламенения; численное моделирование; детальный кинетический механизм; задержка воспламенения, абсорбционные и эмиссионные измерения радикалов

DOI: 10.30826/CE19120204

Литература

1. Singh H. B., O'Hara D., Herlth D., Sachse W., Blake D. R., Bradshaw J. D., Kanakidou M., Crutzen P. J. Acetone in the atmosphere: distribution, sources, and sinks // J. Geophys. Res. Atmos., 1994. Vol. 99. P. 1805–1819.
2. Yujiing M., Mellouki A. The near-UV absorption cross sections for several ketones // J. Photoch. Photobio A, 2000. Vol. 134(1-2). P. 31–36.
3. Sato K., Hidaka Y. Shock-tube and modeling study of acetone pyrolysis and oxidation // Combust. Flame, 2000. Vol. 122. P. 291–311.
4. Tsuboi T., Ishii K., Tamura S. Thermal oxidation of acetone behind reflected shock wave // Nihon Kikai Gakkai Ronbunshu B Hen Tr. Jpn. Soc. Mech. Eng. B, 2001. Vol. 67. P. 2797–2804.
5. Pichon S., Black G., Chaumeix N., Yahyaoui M., Simmie J. M., Curran H. J., Donohue R. The combustion chemistry of a fuel tracer: Measured flame speeds and ignition delays and a detailed chemical kinetic model for the oxidation of acetone // Combust. Flame, 2009. Vol. 156. P. 494–504.
6. Saxena S., Kiefer J. H., Klippenstein S. J. A shock-tube and theory study of the dissociation of acetone and subsequent recombination of methyl radicals // 32nd Symposium (International) on Combustion Proceedings. — Pittsburgh, PA, USA: The Combustion Institute, 2009. P. 123–130.
7. Davidson D. F., Ranganath S. C., Lam K.-Y., Liaw M., Hong Z., Hanson R. K. Ignition delay time measurements of normal alkanes and simple oxygenates // J. Propul. Power, 2010. Vol. 26. No. 2. P. 280–287.
8. Chong Ch. T., Hochgreb S. Measurements of laminar flame speeds of acetone/methane/air mixtures // Combust. Flame, 2011, Vol. 158. No. 3. P. 490–500.
9. Akih-Kumgeh B., Berghthorson J. M. Ignition of C_3 oxygenated hydrocarbons and chemical kinetic modeling of propanal oxidation // Combust. Flame, 2011. Vol. 158. No. 10. P. 1877–1889.
10. Lam K.-Y. Shock tube measurements of oxygenated fuel combustion using laser absorption spectroscopy. Stanford University, 2013. Diss.
11. Tereza A. M., Smirnov V. N., Vlasov P. A., Shumova V. V., Garmash A. A. Emission of OH^* and CO_2^* during the high-temperature oxidation of acetone in reflected shock waves // J. Phys. Conf. Ser., 2017. Vol. 496. P. 012071. 8 p.
12. Yua D., Tian Zh.-Y., Wang Z., Liu Yu.-X., Zhou L. Experimental and theoretical study on acetone pyrolysis in a jet-stirred reactor // Fuel, 2018. Vol. 234. P. 1380–1387.
13. Власов П. А., Назарова Н. В., Смирнов В. Н., Тереза А. М. Воспламенение стехиометрической смеси

*Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований Российской академии наук на 2013–2020 гг. по теме Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук № 49.23. Номер Государственной регистрации ЦИТИС: АААА-А18-118031590088-8.

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, tereza@chph.ras.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, agafonov@chph.ras.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, s.p.medvedev@chph.ras.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», tereza@chph.ras.ru

⁵Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vns1951@yandex.ru

- ацетона с кислородом за отраженными ударными волнами: численное моделирование кинетики свечения OH^* , CO_2^* и поглощения CO_2 // Горение и взрыв, 2018. Т. 11. № 2. С. 4–10.
14. Власов П. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М. Реакции инициирования самовоспламенения смесей $\text{H}_2\text{--O}_2$ в ударных волнах // Хим. физика, 2016. Т. 35. № 6. С. 35–48.
 15. Smirnov V. N., Tereza A. M., Vlasov P. A., Zhiltsova I. V. Luminescent characteristics of the shock-wave ignition of an ethylene–oxygen mixture // Combust. Sci. Technol., 2017. Vol. 189. No. 5. P. 854–868.
 16. Kee R. J., Rupley F. M., Meeks E., Miller J. A. CHEMKIN III. Livermore, CA, USA: Sandia National Laboratories, 1996. Technical Report No. SAND96-8216.
 17. Westbrook C. K., Pitz W. J., Herbinet O., Curran H. J., Silke E. J. A detailed chemical kinetic reaction mechanism for *n*-alkane hydrocarbons from *n*-octane to *n*-hexadecane // Combust. Flame, 2008. Vol. 156. No. 1. P. 181–199.
 18. Wang H., Warner S. J., Oehlschlaeger M. A., Bounaceur R., Biet J., Glaude P. A. An experimental and kinetic modeling study of the autoignition of α -methylnaphthalene/air and α -methylnaphthalene/*n*-decane/air mixtures at elevated pressures // Combust. Flame, 2010. Vol. 157. P. 1976–1978.
 19. Metcalfe W. K., Burke S. M., Ahmed S. S., Curran H. J. A hierarchical and comparative kinetic modeling study of $\text{C}_1\text{--C}_2$ hydrocarbon and oxygenated fuels // Int. J. Chem. Kinet., 2013. Vol. 45. P. 638–675.
 20. Wang H., Dempsey A. B., Yao M., Jia M., Reitz R. D. Kinetic and numerical study on the effects of di-tert-butyl peroxide additive on the reactivity of methanol and ethanol // Energ. Fuel., 2014. Vol. 28(8). P. 5480–5488.
 21. Френклах М. Моделирование кинетических процессов // Химия горения / Под. ред. У. Гардинера (мл.); пер. с англ. — М.: Мир, 1988. С. 374. (Frenklach M. Modeling // Combustion chemistry / Ed. W. C. Gardiner, Jr. — New York, NY, USA: Springer-Verlag, 1984. P. 423–473.)
 22. Гардинер У. (мл.), Троє Ю. Константы скорости реакций термической диссоциации, рекомбинации и изомеризации // Химия горения / Под. ред. У. Гардинера (мл.); пер. с англ. — М.: Мир, 1988. С. 184. (Gardiner W. C., Jr., Troe J. Rate coefficients of thermal dissociation, isomerization, and recombination reactions // Combustion chemistry. — Ed. W. C. Gardiner, Jr. — New York, NY, USA: Springer-Verlag, 1984. P. 173–196.)

Поступила в редакцию 18.01.19