

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И РАСЧЕТ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ МИКРОКАПЕЛЬ ТРИЭТИЛАЛЮМИНИЯ В ВОЗДУХЕ*

Н. М. Кузнецов¹, В. Я. Басевич², А. А. Беляев³, С. М. Фролов⁴, П. А. Стороженко⁵

Аннотация: На основе модельной схемы гетерогенного взаимодействия кислорода с микрокаплями горючего — триэтилалюминия (ТЭА) — с выходом легких углеводородных радикалов в газовую фазу составлена и реализована программа вычисления задержки воспламенения пространственно однородной смеси микрокапель горючего с воздухом. Вычисление выполнено с вариацией кинетических параметров, предназначенной для сравнения с экспериментом.

Ключевые слова: триэтилалюминий; реакция внедрения; константа скорости; энергия активации; микрокапля; задержка воспламенения; образование радикалов; детальная кинетика; вычислительная программа

DOI: 10.30826/CE19120411

Литература

1. Marsel J., Kramer L. Spontaneous ignition properties of metal alkyls // Symposium (International) on Combustion, 1958. Vol. 7. No. 1. P. 906–912. doi: 10.1016/S0082-0784(58)80135-6.
2. Gonçalves R. F. B., Iha K., Rocco J. A. F. F. Reactive molecular dynamics simulation and chemical kinetic evaluation of combustion of triethylaluminum (TEA) // Quim. Nova, 2018. Vol. 41. No. 5. P. 507–511 doi: 10.21577/0100-4042.20170200.
3. Sydora O. L. Selective ethylene oligomerization // Organometallics, 2019. Vol. 38. P. 997–1010. doi: 10.1021/acs.organomet.8b00799.
4. Davis S. M., Yilmaz N. Thermochemical analysis of hypergolic propellants based on triethylaluminum/nitrous oxide // Int. J. Aerospace Eng., 2014. Vol. 2014. Article ID 269836. 5 p. doi: 10.1155/2014/269836.
5. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А., Шамшин И. О. Кинетическая модель окисления и воспламенения $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 3. С. 91–97.
6. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А. Расчет стандартной энтальпии образования и теплоты полного сгорания триэтилалюминия в водяном паре и в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 2. С. 10–13. doi: 10.30826/CE19120202.
7. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980. 478 с.
8. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных алкановых углеводородов. Переход от C_1 – C_3 к C_4H_{10} // Хим. физика, 2007. Т. 26. № 7. С. 37–44.
9. Вильямс Ф. А. Теория горения / Пер. с англ. — М.: Наука, 1971. 615 с. (Williams F. A. Combustion theory. — Addison-Wesley Publishing Co., 1965. 447 p.)
10. Burcat A. Thermodynamic data at the Web site of the Laboratory for Chemical Kinetics. Ideal gas thermodynamic data in polynomial form for combustion and air pollution use, 2005. <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>.
11. Азатян В. В., Коган А. М., Нейгауз М. Г., Поройкова А. И., Александров Е. Н. Роль саморазогрева при горении водорода вблизи первого предела воспламенения // Кинетика и катализ, 1975. Т. 16. № 3. С. 577–585.

Поступила в редакцию 02.04.19

* Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 0082-2016-0011 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоёмких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», номер государственной регистрации АААА-А17-117040610346-5, и субсидии, выделенной ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 14) по теме № 0065-2019-0005 «Математическое моделирование динамических процессов в деформируемых и реагирующих средах с использованием многопроцессорных вычислительных систем» (номер государственной регистрации АААА-А19-119011590092-6).

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, N-M-Kuznetsov@yandex.ru

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

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

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

⁵ГНЦ РФ АО «Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений», bigpastor@mail.ru