

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК H_2 И CO НА ПРОЦЕСС САЖЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ПИРОЛИЗЕ ЭТИЛЕНА И МЕТАНА*

А. Р. Ахуньянов¹, П. А. Власов², В. Н. Смирнов³, В. С. Арутюнов⁴

Аннотация: Рассмотрено влияние добавок H_2 и CO на процесс образования зародышей и частиц сажи при пиролизе этилена и метана в экспериментах за отраженными ударными волнами. Проведено прямое сравнение результатов экспериментов в ударной трубе с результатами кинетических расчетов процесса сажеобразования по разработанной авторами кинетической модели сажеобразования. Эксперименты и расчеты показали существенное уменьшение объемной доли и выхода сажи при пиролизе этилена и метана при добавлении водорода в реагирующую смесь. Установлен детальный кинетический механизм влияния водорода на процесс сажеобразования, присутствие которого приводит к заметному уменьшению концентрации зародышей и частиц сажи, не меняя при этом механизм их поверхностного роста и период индукции процесса сажеобразования. При добавлении CO он не включается в химический механизм сажеобразования, а выступает лишь в качестве газа-разбавителя, не влияя на выход сажи.

Ключевые слова: пиролиз; метан; этилен; сажа; ударные волны; механизм образования сажи

DOI: 10.30826/CE25180103

EDN: XZCKMI

Литература

1. Zhang Y., Xue Y., Xu Z., et al. Effect of H_2/CO addition on soot formation in ethylene diffusion flame // *Frontiers Energy Research*, 2024. Vol. 12. P. 1363363.
2. Wang M., Qian X., Suo Y., et al. Effect of hydrogen addition on soot formation and emission in acetylene laminar diffusion flame // *ACS Omega*, 2023. Vol. 8. No. 28. P. 24893–24900.
3. De Iuliis S. A shock tube and burner study on soot growth rate from ethylene in presence of hydrogen by different optical diagnostics. Food and nutrition: D. Sc. Diss. — Université d'Orléans; Politecnico di Milano, 2009. 224 p.
4. Агафонов Г. Л., Билера И. В., Власов П. А., Жильцова И. В., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М. Единая кинетическая модель сажеобразования при пиролизе и окислении алифатических ароматических углеводородов в ударных волнах // *Кинетика и катализ*, 2016. Т. 57. № 5. С. 571–587.
5. Frenklach M., Taki S., Matula R. A. A conceptual model for soot formation in pyrolysis of aromatic hydrocarbons // *Combust. Flame*, 1983. Vol. 49. P. 275–282.
6. Frenklach M. Computer modeling of infinite reaction sequences: A chemical lumping // *Chem. Eng. Sci.*, 1985. Vol. 40. P. 1843–1849.
7. Frenklach M., Wang H. Detailed mechanism and modeling of soot particle formation // *Soot formation in combustion: Mechanisms and models* / Ed. H. Bockhorn. — Springer ser. in chemical physics. — Berlin: Springer-Verlag, 1994. Vol. 59. P. 165–192.
8. Wang H., Frenklach M. A detailed kinetic modeling study of aromatics formation in laminar premixed acetylene and ethylene flames // *Combust. Flame*, 1997. Vol. 110. No. 1-2. P. 173–221. doi: 10.1016/S0010-2180(97)00068-0.
9. Appel J., Bockhorn H., Frenklach M. Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: Laminar premixed flames of C_2 hydrocarbons // *Combust. Flame*, 2000. Vol. 121. No. 1-2. P. 122–136. doi: 10.1016/S0010-2180(99)00135-2.
10. Richter H., Granata S., Green W. H., Howard J. B. Detailed modeling of PAH and soot formation in a laminar premixed benzene/oxygen/argon low-pressure flame // *P. Combust. Inst.*, 2005. Vol. 30. No. 1. P. 1397–1405. doi: 10.1016/j.proci.2004.08.088.
11. Deuflhard P., Wulkow M. Computational treatment of polyreaction kinetics by orthogonal polynomials of a discrete variable // *Impact Computing Science Engineering*, 1989. Vol. 1. P. 269–301. doi: 10.1016/0899-8248(89)90013-X.
12. Wulkow M. The simulation of molecular weight distributions in polyreaction kinetics by discrete Galerkin methods // *Macromol. Theor. Simul.*, 1996. Vol. 5. P. 393–416. doi: 10.1002/mats.1996.040050303.
13. Агафонов Г. Л., Билера И. В., Власов П. А., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М. Образование

*Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук (номер государственной регистрации 122040500068-0).

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, jkratos69@yandex.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», iz@chph.ras.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vns1951@yandex.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, arutyunov@chph.ras.ru

- сажи при пиролизе и окислении ацетилена и этилена в ударных волнах // Кинетика и катализ, 2015. Т. 56. № 1. С. 15–35. doi: 10.7868/S0453881115010013.
14. Wang H., You X., Joshi A. V., Davis S. G., Laskin A., Egolfopoulos F., Law C. K. USC Mech Version II. High temperature combustion reaction model of H₂/CO/C₁–C₄ compounds, 2007. http://ignis.usc.edu/USC-Mech_II.htm.
 15. Skjøth-Rasmussen M. S., Glarborg P., Østberg M., Johannessen J. T., Livbjerg H., Jensen A. D., Christensen T. S. Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and soot in fuel-rich oxidation of methane in a laminar flow reactor // Combust. Flame, 2004. Vol. 136. P. 91–128. doi: 10.1016/j.combustflame.2003.09.011.
 16. Frenklach M., Warnatz J. Detailed modeling of PAH profiles in a sooting low-pressure acetylene flame // Combust. Sci. Technol., 1987. Vol. 51. P. 265–283. doi: 10.1080/00102208708960325.
 17. Wang H., Dames E., Sirjean B., Sheen D. A., Tangko R., Violi A. A high-temperature chemical kinetic model of *n*-alkane (up to *n*-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, *n*-propyl and *n*-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures. JetSurF Version 2.0, 2010. <http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/JetSurF/JetSurF2.0/index.htm>.
 18. Correa C., Niemann H., Schramm B., Warnatz J. Reaction mechanism reduction for higher hydrocarbons by the ILDM method // P. Combust. Inst., 2000. Vol. 28. P. 1607–1614. doi: 10.1016/S0082-0784(00)80558-5.
 19. Agafonov G. L., Mikhailov D. I., Smirnov V. N., Tereza A. M., Vlasov P. A., Zhiltsova I. V. Shock tube and modeling study of chemical ionization in the oxidation of acetylene and methane mixtures // Combust. Sci. Technol., 2016. Vol. 188. No. 11–12. P. 1815–1830. doi: 10.1080/00102202.2016.1211861.
 20. Vlasov P. A., Zhiltsova I. V., Smirnov V. N., Tereza A. M., Agafonov G. L., Mikhailov D. I. Chemical ionization of *n*-hexane, acetylene, and methane behind reflected shock waves // Combust. Sci. Technol., 2018. Vol. 190. No. 1. P. 57–81. doi: 10.1080/00102202.2017.1374954.
 21. Власов П. А., Ахуньянов А. Р., Смирнов В. Н. Экспериментальное и расчетно-теоретическое исследование пиролиза и окисления метана в отраженных ударных волнах с учетом сажеобразования // Кинетика и катализ, 2022. Т. 63. № 2. С. 160–177. doi: 10.31857/S0453881122020149.

Поступила в редакцию 23.12.2024

После доработки 09.01.2025

Принята к публикации 16.01.2025