

О МЕХАНИЗМЕ ДЕЙСТВИЯ ДОБАВКИ ПРОПИЛЕНА НА САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ ВОДОРОДА ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ*

С. М. Фролов¹, А. А. Беляев², И. С. Гордополова³, Ф. С. Фролов⁴

Аннотация: На основе анализа теоретических положений и численного моделирования проведено исследование механизма действия добавок непредельных углеводородов (на примере пропилена) на самовоспламенение водорода в воздухе при атмосферном давлении в реакторе с адиабатическими и изотермическими стенками. Расчеты проводились с помощью программного комплекса ANSYS CHEMKIN с использованием детального кинетического механизма (ДКМ) NUIGMech 1.1 (2020). Для примера рассмотрены бедная и стехиометрическая водородно-воздушные смеси (ВВС) с добавками 1 и 2 % (об.) пропилен. Показано, что механизм действия таких добавок является тепловым, т. е. предотвратить развитие цепной лавины можно только отбором тепла. При слабом теплоотводе даже значительная добавка пропилен не срывает процесс самовоспламенения. Более того, и при слабом теплоотводе, когда самовоспламенение есть, и при сильном теплоотводе, когда самовоспламенения нет, процесс в качественном плане развивается одинаково, а добавки пропилен оказывают лишь некоторое влияние на ход кинетических кривых, либо уменьшая, либо увеличивая период индукции самовоспламенения. Результаты проведенных расчетов позволяют предположить, что различные горючие вещества (например, H_2 и C_3H_6) в многокомпонентных смесях с воздухом окисляются, воздействуя друг на друга в основном через тепло, которое выделяется или поглощается в разные моменты времени. Поскольку реакции гибели атомов и радикалов идут с выделением тепла и, следовательно, приводят к более быстрому возникновению цепной лавины, искать ингибиторы, которые захватывают атомарный водород, неперспективно. Этот вывод можно отнести ко всем непредельным углеводородам.

Ключевые слова: водород; самовоспламенение; пропилен; ингибитор; промотор; детальный кинетический механизм; численное моделирование

DOI: 10.30826/CE26190101

EDN: KOOBFA

Литература

1. Kumar L., Sleiti A. K. A comprehensive review of hydrogen safety through a metadata analysis framework // *Renew. Sust. Energ. Rev.*, 2025. Vol. 214. P. 115509. doi: 10.1016/j.rser.2025.115509.
2. Азатян В. В. Цепные реакции в процессах горения, взрыва и детонации газов. — Черноголовка: Изд-во РАН, 2017. 112 с.
3. Азатян В. В. Особенности физико-химических механизмов и кинетических закономерностей горения, взрыва и детонации газов // *Кинетика и катализ*, 2020. Т. 61. № 3. С. 291–311.
4. Азатян В. В. Цепные реакции горения, взрыва и детонации в газах. Химические методы управления. — М.: Изд-во РАН, 2020. 360 с.
5. Беляев А. А., Ермолаев Б. С., Гордополова И. С. О действии углеводородной добавки, подавляющей цепное развитие реакции в водородно-воздушных смесях // *Горение и взрыв*, 2024. Т. 17. № 1. С. 27–39. doi: 10.30826/CE24170103.
6. Беляев А. А., Ермолаев Б. С. Особенности ингибирования водородно-воздушных смесей добавкой пропилен // *Хим. физика*, 2024. Т. 43. № 8. С. 10–23. doi: 10.31857/S0207401X24080023.
7. Беляев А. А., Ермолаев Б. С., Гордополова И. С. Кинетический анализ действия добавки пропилен на воспламенение и горение водородно-воздушных смесей // *Хим. физика*, 2025. Т. 44. № 8. С. 3–17. doi: 10.31857/S0207401X25080014.
8. NUIGMech1.1. National University of Ireland Galway, 2020.
9. Семенов Н. Н. Цепные реакции. — Госхимтехиздат, 1934. 389 с.

* Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований РФ «Химическая физика окисления, горения и взрыва», регистрационный номер 1024040200065-4, и имела бюджетное финансирование. Работа выполнена также в рамках государственного задания ИСМАН № 125021201988-9.

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

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук,

belyaevINF@yandex.ru

³Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А. Г. Мержанова Российской академии наук, gisochka@yandex.ru

⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, f.frolov@chph.ru

10. *Drakon A. V., Emelianov A. V., Eremin A. V., Gurentsov E. V., Petrushevich Yu. V., Starostin A. N., Taran M. D., Fortov V. E.* Quantum phenomena in ignition and detonation at elevated density // *Phys. Rev. Lett.*, 2012. Vol. 109. P. 183201.
11. *Леванов А. В.* Анализ пределов воспламенения смеси H_2-O_2 обобщенным методом квазистационарных концентраций. — М.: Изд-во МГУ, 2017. 32 с.
12. *Вильямс Ф. А.* Теория горения / Пер. с англ. под ред. С. С. Новикова, Ю. С. Рязанцева. — М.: Наука, 1971. 616 с. (*Williams F. A.* Combustion theory: The fundamental theory of chemically reacting flow systems. — Reading, MA, USA: Addison-Wesley Publishing Co., 1965. 447 p.)
13. *Ranzy E., Frassoldati A., Grana R., Cuoci A., Faruvelli T., Kelley A. P., Law C. K.* Hierarchical and comparative kinetic modelling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels // *Prog. Energ. Combust.*, 2012. Vol. 38. No. 4. P. 468–501. doi: 10.1016/j.peccs.2012.03.004.
14. *Ranzy E., Cavallotti C., Cuoci A., Frassoldati A., Pel-luchi M., Faruvelli T.* New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of *n*-alkanes // *Combust. Flame*, 2015. Vol. 162. No. 5. P. 1679–1691. doi: 10.1016/j.combustflame.2014.11.030.
15. CHEMKIN-PRO 15112: Tutorials Manual (CK-TUT-10112-1112-UG-1). — San Diego, CA, USA: Reaction Design, 2011.
16. *Frolov S. M., Basevich V. Ya., Smetanyuk V. A., Belyaev A. A., Pasman H. J.* Modeling of *n*-butane ignition, combustion, and preflame oxidation in the 20-liter vessel // *J. Loss Prevent. Proc.*, 2007. Vol. 20. Iss. 4-6. P. 562–569.
17. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987. 491 с.
18. Кутателадзе С. С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. — М.: Энергоатомиздат, 1990. 367 с.
19. Теплотехника / Под ред. В. И. Луканина. — 2-е изд. — М.: Высшая школа, 2000. 671 с.
20. *Momtchiloff I. N., Taback E. D., Buswell R. F.* Calculation of ignition delays for hypersonic ramjets // *P. Combust. Inst.*, 1963. Vol. 9. P. 220–230.
21. *Slack M., Grillo A.* Investigation of hydrogen–air ignition sensitized by nitric oxide and by nitrogen oxide. NASA Report CR-2896, 1977.
22. *Panigrahy S., Abd El-Sabor Mohamed A., Wang P., Bourque G., Curran H. J.* When hydrogen is slower than methane to ignite // *P. Combust. Inst.*, 2023. Vol. 39. P. 253–263. doi: 10.1016/j.proci.2022.08.025.
23. *Medvedev S. P., Agafonov G. L., Khomik S. V., Gelfand B. E.* Ignition delay in hydrogen–air and syngas–air mixtures: Experimental data interpretation via flame propagation // *Combust. Flame*, 2010. Vol. 157. P. 1436–1438. doi: 10.1016/j.combustflame.2010.03.003.
24. *Frolov S. M., Emans M., Ivanov V. S., Basara B., Leshevich V. V., Penyazkov O. G.* 3D simulation of hydrogen ignition in a rapid compression machine // *J. Loss Prevent. Proc.*, 2013. Vol. 26. P. 1558–1568.
25. *Burke S. M., Burke U., Mc Donald R., et al.* An experimental and modeling study of propene oxidation. Part 2: Ignition delay time and flame speed measurements // *Combust. Flame*, 2015. Vol. 162. No. 2. P. 296–314. doi: 10.1016/j.combustflame.2014.07.032.
26. *Frolov S. M., Medvedev S. N., Basevich V. Ya., Frolov F. S.* Self-ignition of hydrocarbon–hydrogen–air mixtures // *Int. J. Hydrogen Energ.*, 2013. Vol. 38. P. 4177–4184.
27. *Азатян В. В., Борисов А. А., Мержанов А. Г. и др.* Ингибирование различных режимов горения водорода в воздухе пропиленом и изопропиловым спиртом // *Физика горения и взрыва*, 2005. Т. 41. № 1. С. 3–14.
28. *Азатян В. В., Медведев С. М., Фролов С. М.* Математическое моделирование химического ингибирования детонации водородно-воздушных смесей // *Хим. физика*. 2010. Т. 29. № 4. С. 56–69.
29. *Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Михальченко Е. В., Станов Л. И.* Срыв развитой детонации водородно-воздушной смеси малой добавкой углеводородного ингибитора // *Физика горения и взрыва*, 2022. Т. 58. № 5. С. 64–71. doi: 10.15372/FGV20220508.
30. *Smirnov N. N., Azatyan V. V., Nikitin V. F., et al.* Control of detonation in hydrogen–air mixtures // *Int. J. Hydrogen Energ.*, 2024. Vol. 49. P. 1315–1324. doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.11.085.

Поступила в редакцию 20.10.2025

После доработки 17.02.2026

Принята к публикации 23.02.2026