ГОРЕНИЕ И ВЗРЫВ, 2026. Том 19. №2. С. 14–22

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ САЖЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ПИРОЛИЗЕ СМЕСЕЙ ЭТИЛЕНА И ПРОПИЛЕНА

А. Р. Ахуньянов[1], П. А. Власов[2], В. Н. Смирнов[3], Ю. А. Кровякова[4], В. С. Арутюнов[5], Д. И. Михайлов[6]

Аннотация: Экспериментально и расчетно-теоретически исследуется процесс сажеобразования при пиролизе смесей этилена и пропилена в аргоне за отраженными ударными волнами в интервале температур 1800–2700 K и давлении за фронтом отраженной ударной волны около 4 бар. Показано, что выход частиц сажи при пиролизе пропилена C_3H_6 значительно превышает выход сажи в случае пиролиза этилена C_2H_4 при равенстве полной концентрации атомов углерода в реагирующей смеси. Большая склонность к сажеобразованию пропилена объясняется более легким образованием резонансно-стабилизированных пропаргильных радикалов C_3H_3 из-за наличия в молекуле пропилена группы $-CH_3$.

Ключевые слова: ударная труба; пиролиз этилена и пропилена; сажеобразование; экспериментальное измерение температуры; выход сажи; кинетические расчеты

DOI: 10.30826/CE26190202 **EDN:** LJABHX

Литература

1. *Saggese C., Sánchez N. E., Frassoldati A., Cuoci A., Faravelli T., Alzueta M. U., Ranzi E.* Kinetic modeling study of polycyclic aromatic hydrocarbons and soot formation in acetylene pyrolysis // Energ. Fuel., 2014. Vol. 28. No. 2. P. 1489–1501.
2. *Sun W., Hamadi A., Abid S., Chaumeix N., Comandini A.* Influences of propylene/propyne addition on toluene pyrolysis in a single-pulse shock tube // Combust. Flame, 2022. Vol. 236. P. 111799.
3. *Martin J. W., Salamanca M., Kraft M.* Soot inception: Carbonaceous nanoparticle formation in flames // Prog. Energ. Combust., 2022. Vol. 88. P. 100956.
4. *Altarawneh M., Ali L.* Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in thermal systems: A comprehensive mechanistic review // Energ. Fuel., 2024. Vol. 38. No. 22. P. 21735–21792.
5. *Bagheri G., Ranzi E., Pelucchi M., Parente A., Frassoldati A., Faravelli T.* Comprehensive kinetic study of combustion technologies for low environmental impact: MILD and OXY-fuel combustion of methane // Combust. Flame, 2020. Vol. 212. P. 142–155.
6. *Дракон А. В., Еремин А. В., Золотаренко В. Н., Коршунова М. Р., Михеева Е. Ю.* Склонность к сажеобразованию различных углеводородов при пиролизе за ударными волнами // Кинетика и катализ, 2024. Т. 65. № 6. С. 609–628.
7. *Vlasov P. A., Warnatz J.* Detailed kinetic modeling of soot formation in hydrocarbon pyrolysis behind shock waves // P. Combust. Inst., 2002. Vol. 29. No. 2. P. 2335–2341.
8. *Агафонов Г. Л., Власов П. А., Смирнов В. Н.* Образование сажи при пиролизе бензола, метилбензола и этилбензола в ударных волнах // Кинетика и катализ, 2011. Т. 52. № 3. С. 368–381.
9. *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.
10. *Frenklach M.* Computer modeling of infinite reaction sequences: A chemical lumping // Chem. Eng. Sci., 1985. Vol. 40. P. 1843–1849.
11. *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.
12. *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.
13. *Appel J., Bockhorn H., Frenklach M.* Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics:

[1]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, jkratos69@yandex.ru
[2]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», iz@chph.ras.ru
[3]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vns1951@yandex.ru
[4]Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», juliakro2002@gmail.com
[5]Федеральный 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
[6]Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, mihalych2006@mail.ru

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.

14. *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.
15. *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.
16. *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.
17. *Агафонов Г. Л., Билера И. В., Власов П. А., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М.* Сажеобразование при пиролизе и окислении ацетилена и этилена в ударных волнах // Кинетика и катализ, 2015. Т. 56. № 1. С. 15–33. doi: 10.1134/S0023158415010012.
18. *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 $H_2/CO/C_1–C_4$ compounds. 2007. http://ignis.usc.edu/USCMechII.htm.
19. *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 и ароматических углеводородов в ударных волнах // Кинетика и катализ, 2016. Т. 57. № 5. С. 571–587.
20. *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.
21. *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.
22. *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-butylcyclohexane oxidation at high temperatures. JetSurF Version 2.0. 2010. http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/JetSurF/JetSurF2.0/index.htm.
23. *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.
24. *Hansen N., Klippenstein S. J., Westmoreland P. R., Kasper T., Kohse-Höinghaus K., Wang J., Cool T. A.* A combined ab initio and photoionization mass spectrometric study of polyynes in fuel-rich flames // Phys. Chem. Chem. Phys., 2008. Vol. 10. No. 3. P. 366–374. doi: 10.1039/B711578D.
25. *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.
26. *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 16.12.2025
После доработки 04.02.2026
Принята к публикации 09.02.2026