ГОРЕНИЕ И ВЗРЫВ, 2026. Том 19. №3. С. 3–10

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОКИСЛЕНИЯ ДИЭТИЛОВОГО ЭФИРА

Н. С. Быстров[1], А. В. Емельянов[2], Е. С. Курбатова[3], П. И. Яценко[4]

Аннотация: Работа посвящена исследованию высокотемпературного окисления диэтилового эфира (ДЭЭ, $C_2H_5OC_2H_5$), рассматриваемого в качестве перспективного компонента синтетических топливных смесей. Экспериментальные исследования выполнены за отраженными ударными волнами в диапазоне температур 900–3400 K и давлений 1,7–3,7 бар. В качестве окислителя использовали O_2; начальный состав смеси — 5 ppm ДЭЭ + 30 ppm O_2 + Ar. Методом атомно-резонансной абсорбционной спектрометрии (АРАС) на длине волны 130,5 нм получены времяразрешенные абсорбционные профили атомарного кислорода, которые далее преобразованы в концентрационные профили. Впервые полученные экспериментальные результаты представляют собой значимый набор данных для валидации и последующего совершенствования кинетических моделей. Концентрационные профили атомов кислорода промоделированы с использованием современных кинетических механизмов горения ДЭЭ. Показано расхождение расчетов с экспериментом, значительно возрастающее при повышении температуры.

Ключевые слова: диэтиловый эфир; окисление; атомно-резонансная абсорбционная спектрометрия; ударные волны; кинетическое моделирование

DOI: 10.30826/CE26190301 **EDN:** VGRQXY

Литература

1. *Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Loukhovitski B., Sharipov A., Yatsenko P.* Experimental study of high temperature oxidation of dimethyl ether, n-butanol and methane // Combust. Flame, 2020. Vol. 218. P. 121–133. doi: 10.1016/j.combustflame.2020.04.003.
2. *Capriolo G., Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Yatsenko P., Konnov A. A.* High-temperature oxidation of propanol isomers in the mixtures with N_2O at high Ar dilution conditions // Fuel, 2021. Vol. 287. P. 119499. doi: 10.1016/j.fuel.2020.119499.
3. *Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Yatsenko P.* Study of kinetics of high-temperature oxidation of basic furan compounds under high-dilute conditions — part I: Furan // Combust. Flame, 2026. Vol. 285. P. 114685. doi: 10.1016/j.combustflame.2025.114685.
4. *Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Yatsenko P.* Study of kinetics of high-temperature oxidation of basic furan compounds under high-dilute conditions — part II: Tetrahydrofuran // Combust. Flame, 2026. Vol. 285. P. 114686. doi: 10.1016/j.combustflame.2025.114686.
5. *Leitner W., Klankermayer J., Pischinger S., et al.* Advanced biofuels and beyond: Chemistry solutions for propulsion and production // Angew. Chem. Int. Edit., 2017. Vol. 56. No. 20. P. 5412–5452. doi: 10.1002/anie.201607257.
6. *Bailey B., Eberhardt J., Goguen S., Erwin J.* Diethyl ether (DEE) as a renewable diesel fuel. SAE Technical Paper, 1997. P. 972978. doi: 10.4271/972978.
7. *Xie J., Song J., Konnov A. A., Su B., Wang T., Sun K.* Effects of detailed kinetics and thermodynamics of DEE $+NH_2$ reactions on the ignition of ammonia blended with DEE // Combust. Flame, 2025. Vol. 274. P. 113966. doi: 10.1016/j.combustflame.2025.113966.
8. *Werler M., Cancino L. R., Schiessl R., Maas U., Schulz C., Fikri F.* Ignition delay times of diethyl ether measured in a high-pressure shock tube and a rapid compression machine // P. Combust. Inst., 2015. Vol. 35. No. 1. P. 259–266. doi: 10.1016/j.proci.2014.06.143.
9. *Tran L.-S., Herbinet O., Li Y., Wullenkord J., Zeng M., Bräuer E., Qi E., Kohse-Höinghaus K., Battin-Leclerc F.* Low-temperature gas-phase oxidation of diethyl ether: Fuel reactivity and fuel-specific products // P. Combust. Inst., 2019. Vol. 37. No. 1. P. 511–519. doi: 10.1016/j.proci.2018.05.135.
10. *Sakai Y., Ando H., Chakravarty H. K., Pitsch H., Fernandes R. X.* A computational study on the kinetics of unimolecular reactions of ethoxyethylperoxy radicals employing CTST and VTST // P. Combust. Inst., 2015. Vol. 35. No. 1. P. 161–169. doi: 10.1016/j.proci.2014.05.099.

[1]Объединенный институт высоких температур РАН, bystrovns.jiht@gmail.com
[2]Объединенный институт высоких температур РАН, aemelia@ihed.ras.ru
[3]Объединенный институт высоких температур РАН; Московский физико-технический институт, kurbatova.lz@yandex.ru
[4]Объединенный институт высоких температур РАН; Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана, pavelyatcenko@yandex.ru

11. *Hu E., Chen Y., Zhang Z., Chen J.-Y., Huang Z. Ab initio* calculation and kinetic modeling study of diethyl ether ignition with application toward a skeletal mechanism for CI engine modeling // Fuel, 2017. Vol. 209. P. 509–520. doi: 10.1016/j.fuel.2017.07.105.
12. *Dai L., Liu J., Zou C., Lin Q., Jiang T., Peng C.* Shock tube and comprehensive kinetic modeling study of ammonia/diethyl ether (DEE) mixtures // Combust. Flame, 2024. Vol. 265. P. 113482. doi: 10.1016/j.combustflame.2024.113482.
13. *Shrestha K. P., Giri B. R., Elbaz A. M., Issaev G., Roberts W. L., Seidel L., Mauss F., Farooq A.* A detailed chemical insights into the kinetics of diethyl ether enhancing ammonia combustion and the importance of NOx recycling mechanism // Fuel Communications, 2022. Vol. 10. P. 100051. doi: 10.1016/j.jfueco.2022.100051.
14. *Bystrov N. S., Emelianov A. V., Eremin A. V., Yatsenko P. I.* New insight into dissociation of molecular oxygen at temperatures below 5000 K // Combust. Flame, 2023. Vol. 258. P. 113096. doi: 10.1016/j.combustflame. 2023.113096.
15. *Быстров Н. С., Емельянов А. В., Еремин А. В., Яценко П. И.* Экспериментальное исследование реакции *н*-бутанола с кислородом за ударными волнами АРАС методом // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2019. Т. 20. Вып. 1. С. 1–15. doi: 10.33257/PhChGD.20.1.799 .
16. *Bremner L. J., Curtis M. G., Walker I. C.* Electronic states of some simple ethers studied by vacuum ultraviolet absorption and near-threshold electron energy-loss spectroscopy // J. Chem. Soc. Faraday T., 1991. Vol. 87. No. 8. P. 1049.
17. *Feng R., Brion C. E.* Quantitative photoabsorption of diethyl ether in the valence and carbon 1s inner shell regions (5–360 eV) // Chemical Physics, 2002. Vol. 284. No. 3. P. 615–623. doi: 10.1016/S0301-0104(02)00788-7.
18. *Doner A. C., Webb A. R., Dewey N. S., Hartness S. W., Christianson M. G., Koritzke A. L., Larsson A., Frandsen K. M., Rotavera B.* Vacuum-ultraviolet absorption cross-sections of functionalized four-carbon species // J. Quant. Spectrosc. Ra., 2022. Vol. 292. P. 108346. doi: 10.1016/j.jqsrt.2022.108346.
19. *Goodwin D. G., Moffat H. K., Schoegl I., Speth R. L., Weber B. W.* Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. — Zenodo, 2024. doi: 10.5281/zenodo.14455267.
20. *Sakai Y., Herzler J., Werler M., Schulz C., Fikri M.* A quantum chemical and kinetics modeling study on the autoignition mechanism of diethyl ether // P. Combust. Inst., 2017. Vol. 36. No. 1. P. 195–202.

Поступила в редакцию 29.12.2025
После доработки 30.04.2026
Принята к публикации 12.05.2026