

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК МЕТАНА, БЕНЗОЛА И РАДИКАЛОВ CH_3 , CH_2 И CH НА ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ ЧАСТИЦ САЖИ ПРИ ПИРОЛИЗЕ СИЛЬНО РАЗБАВЛЕННЫХ СМЕСЕЙ АЦЕТИЛЕНА С АРГОНОМ*

П. А. Власов¹, В. Н. Смирнов², А. Р. Ахуньянов³, Г. Л. Агафонов⁴, Э. Бузилло⁵

Аннотация: Рассмотрено влияние добавок метана, бензола и радикалов CH_3 , CH_2 и CH на процесс образования частиц сажи при пиролизе сильно разбавленных смесей ацетилена с аргоном. Проведено прямое сравнение результатов детальных кинетических расчетов образования частиц сажи при пиролизе смесей ацетилена, бензола и метана с аргоном по единой кинетической модели сажеобразования с результатами собственных экспериментов авторов на ударной трубе в отраженных ударных волнах. Полученное хорошее согласие результатов кинетических расчетов с результатами экспериментов явилось основанием для проведения численных экспериментов для очень сильно разбавленных смесей и повышенных давлений, что позволило сохранить концентрацию атомов углерода в исследуемой смеси и свести к минимуму изменение температуры в процессе пиролиза исследуемой смеси и образования конденсированной дисперсной фазы.

Ключевые слова: пиролиз углеводородов; образование частиц сажи; ударная труба; детальное кинетическое моделирование; промотирующие добавки

DOI: 10.30826/CE22150102

Литература

1. 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.
2. 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.
3. 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.
4. Eremin A., Mikheyeva E., Selyakov I. Influence of methane addition on soot formation in pyrolysis of acetylene // Combust. Flame, 2018. Vol. 193. P. 83–91.
5. Drakon A., Eremin A., Mikheyeva E., Shu Bo, Fikri M., Schulz C. Soot formation in shock-wave-induced pyrolysis of acetylene and benzene with H_2 , O_2 , and CH_4 addition // Combust. Flame, 2018. Vol. 198. P. 158–168.
6. Eremin A., Mikheyeva E. The role of methyl radical in soot formation // Combust. Sci. Technol., 2019. Vol. 191. No. 12. P. 2226–2242. doi: 10.1080/00102202.2018.1551892.
7. Li Z., Amin H. M. F., Liu P., Wang Yu, Chung S. H., Roberts W. L. Effect of dimethyl ether (DME) addition on sooting limits in counterflow diffusion flames of ethylene at elevated pressures // Combust. Flame, 2018. Vol. 197. P. 463–470.
8. Li Z., Liu P., Zhang P., Wang Yu, He H., Chung S. H., Roberts W. L. Role of dimethyl ether in incipient soot formation in premixed ethylene flames // Combust. Flame, 2020. Vol. 216. P. 271–279.
9. Drakon A., Eremin A., Korshunova M., Mikheyeva E. PAH formation in the pyrolysis of benzene and dimethyl ether mixtures behind shock waves // Combust. Flame, 2021. Vol. 232. P. 111548. doi: 10.1016/j.combustflame.2021.111548.

* Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук, тема ФИЦ ХФ РАН 0082-2019-0014 (номер госрегистрации АААА-А20-120020590084-9).

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», iz@chph.ras.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, vns1951@yandex.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, jkratos69@yandex.ru

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

⁵РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина, emmanuel.busillo@gmail.com

10. 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.
11. Ступоченко Е. В., Лосев С. А., Осипов А. И. Релаксационные процессы в ударных волнах. — Москва: Наука, 1965. 328 с.
12. Haynes B. S., Wagner H. G. Soot formation // Prog. Energ. Combust., 1981. Vol. 7. No. 4. P. 229–273.
13. Агафонов Г. Л., Билера И. В., Власов П. А., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М. Образование сажи при пиролизе и окислении ацетилена и этилена в ударных волнах // Кинетика и катализ, 2015. Т. 56. № 1. С. 15–35.
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. <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.
16. 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. P. 1397–1405.
17. 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.
18. 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.html>.
19. 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.
20. 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. P. 366–374.

Поступила в редакцию 30.12.2021