

О ДЕЙСТВИИ УГЛЕВОДОРОДНОЙ ДОБАВКИ, ПОДАВЛЯЮЩЕЙ ЦЕПНОЕ РАЗВИТИЕ РЕАКЦИИ В ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЯХ

А. А. Беляев¹, Б. С. Ермолаев², И. С. Гордополова³

Аннотация: Ингибирующее действие небольших добавок углеводородов на горение и взрыв водородно-воздушных смесей доказано экспериментальными данными по детонации и горению богатых композиций. Механизм, предложенный в работах отечественных авторов, связан с особенностями протекания разветвленных цепных реакций. Математическое моделирование детонации водородно-воздушных смесей с добавкой пропилена подтвердило эффект. Однако в этих работах детальная химическая кинетика распространялась только на водородно-воздушную смесь. В данной работе детальная кинетика применена ко всем компонентам смеси. Решение получено для трех модельных задач: самовоспламенение в реакторе постоянного объема, распространение ламинарного пламени и зажигание газа нагретой проволокой. Объектами исследования были стехиометрическая смесь водорода (29,6 % (об.)) с воздухом без добавок и с 1%-ной добавкой пропилена. Расчеты показали, что помимо молекул пропилена в химических реакциях участвуют продукты его разложения и окисления. При этом они не только способны присоединять атомарный водород, вызывая обрыв цепей, но в определенных условиях могут его и генерировать. Сильный эффект ингибирования получен в задаче о самовоспламенении (начальное давление 1 атм) при начальной температуре 1000 К: добавка пропилена вызвала рост задержки воспламенения более чем на два порядка величины. Однако как при увеличении, так и при уменьшении начальной температуры (исследован интервал от 800 до 1400 К) эффект ингибирования почти полностью исчезает. Отсутствует ингибирование в расчетах нормальной скорости горения (добавка пропилена снижает скорость горения всего на 11%) и критических условий зажигания накаливаемой проволокой. Даются объяснения полученных эффектов с использованием скоростей ведущих химических реакций и физических особенностей рассмотренных задач.

Ключевые слова: водородно-воздушные смеси; пропилен; ингибирование; самовоспламенение; ламинарное пламя; зажигание нагретой поверхностью

DOI: 10.30826/CE24170103

EDN: JHEIZH

Литература

1. Азатян В. В. Температурная зависимость скорости разветвленно-цепных реакций // Кинетика и катализ, 1976. Т. 17. № 2. С. 533.
2. Копылов С. Н. Новые классы эффективных гомогенных ингибиторов газозафазного горения и развитие научных основ их использования: Дис. . . . д-ра техн. наук. — ФГУ ВНИИПО МВД, 2001.
3. Азатян В. В. Цепные реакции в процессах горения, взрыва и детонации газов. — Черногоровка: Изд-во РАН, 2017. 448 с.
4. Азатян В. В. Цепные реакции горения, взрыва и детонации в газах. Химические методы управления. — М.: Изд-во РАН, 2020. 360 с.
5. 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. doi: 10.31857/S0453881120030041.
6. Азатян В. В., Борисов А. А., Мержанов А. Г., Калачев В. И., Масалова В. В., Маилков А. Е., Трошин К. Я. Ингибирование различных режимов горения водорода в воздухе пропиленом и изопропиловым спиртом // Физика горения и взрыва, 2005. Т. 41. № 1. С. 3–14.
7. Азатян В. В., Бакланов Д. И., Гордополова И. С., Абрамов С. К., Пилюян А. А. Ингибирование стационарных волн детонации в водородно-воздушных смесях // Докл. Акад. наук, 2007. Т. 415. № 2. С. 210–213.
8. Азатян В. В., Медведев С. Н., Фролов С. М. Математическое моделирование химического ингибирования детонации водородно-воздушных смесей // Хим. физика, 2010. Т. 29. № 4, С. 56–69.

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

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, boris.ermolaev@mail.ru

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

9. *Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Михальченко Е. В., Стамов 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.
10. *Smirnov N. N., Azatyan V. V., Nikitin V. F., Mikhalchenko E. V., Smirnova M. N., Stamov L. I., Tyurenkova V. V.* 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.
11. *Бунев В. А., Большова Т. А., Бабкин В. С.* Численное исследование распространения ламинарного пламени в богатых водородовоздушных смесях с добавкой этанола // *Физика горения и взрыва*, 2016. Т. 52. № 3. С. 3–7. doi: 10.15372/FGV20160301.
12. *Гельфанд Б. Е.* Пределы детонации воздушных смесей с двухкомпонентными газообразными горючими веществами // *Физика горения и взрыва*, 2002. Т. 38. № 5, С. 101–104.
13. ANSYS Academic Research CFD. CHEMKIN-Pro 15112. — San Diego, CA, USA: Reaction Design, 2011. СК-TUT-10112-1112-UG-1.
14. *Беляев А. А., Ермолаев Б. С.* К стационарной теории зажигания газов нагретым телом // *Горение и взрыв*, 2022. Т. 15. № 3. С. 3–17. doi: 10.30826/CE.
15. NUIGMech1.1. National University of Ireland Galway, 2020. <https://www.universityofgalway.ie/combustionchemistrycentre/mechanismdownloads/>.
16. *Arutyunov V., Belyaev A., Arutyunov A., Troshin K., Nikitin A.* Autoignition of methane–hydrogen mixtures below 1000 K // *Processes*, 2022. Vol. 10. P. 2177. doi: 10.3390/pr10112177.
17. *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.
18. *Slack M., Grillo A.* Investigation of hydrogen–air ignition sensitized by nitric oxide and by nitrogen oxide. NASA Report CR-2896, 1977.
19. *Гельфанд Б. Е., Попов О. Е., Чайванов Б. Б.* Водород: параметры горения и взрыва. — М.: Физматлит, 2008. 288 с.
20. *Зельдович Я. Б.* Теория зажигания накаливаемой поверхностью // *ЖЭТФ*, 1939. Т. 9. Вып. 12. С. 1530–1534.
21. *Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М.* Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980. 478 с.
22. *Voeck L. R., Meijers M., Kink A., Mevel R., Shepherd J. E.* Ignition of fuel–air mixtures from a hot circular cylinder // *Combust. Flame*, 2017. Vol. 185. P. 265–277. doi: 10.1016/j.combustflame.2017.07.007.
23. *Кутателадзе С. С.* Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. — М.: Энергоатомиздат, 1990. 367 с.
24. *Замашников В. В., Бунев В. А.* Об оценке эффективности действия ингибиторов на горение газов // *Физика горения и взрыва* 2001. Т. 37. № 4. С. 15–24.
25. *Bunev A. V., Babkin V. S.* Effect of propylene additives on rich hydrogen–air flames // *Mendeleev Commun.*, 2006. Vol. 16(2). P. 104–105. doi: 10.1070/MC2006v016n02ABEH002270.

Поступила в редакцию 13.12.2023