

А.Э. КОЗАЧЕНКО^{1,2}, Г.Л. АГАФОНОВ¹, В.Н. СМІРНОВ¹, А.М. ТЕРЕЗА¹, С.П. МЕДВЕДЕВ¹

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет, Москва, Россия

ИЗУЧЕНИЕ КИНЕТИКИ ДВУХКАНАЛЬНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО РАСПАДА ПРОПЕНА

С помощью теории РРКМ определены значения констант скорости в пределах низких (k_0) и высоких (k_∞) давлений двухканального термического распада пропена с образованием $\text{aC}_3\text{H}_5+\text{H}$ и $\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_3$. Сравнительный анализ с теоретическими данными, представленными в литературе, показал значительный разброс значений k_0 и k_∞ , используемых при численном моделировании пиролиза пропена. Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными по выходу атомов Н за отраженными ударными волнами, представленными в литературе, позволили определить параметры Трое для построения значений констант скорости обоих каналов в переходной (*fall-off*) области давления в диапазоне температур 1300 – 2000 К.

A.E. KOZACHENKO^{1,2}, G.L. AGAFONOV¹, V.N. SMIRNOV¹, A.M. TEREZA¹, S.P. MEDVEDEV¹

¹N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

²National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

THE STUDY OF THE KINETICS OF TWO-CHANNEL THERMAL DECAY OF PROPENE

The RRKM theory is used to determine the rate constants for the two-channel thermal decomposition of propene to form $\text{aC}_3\text{H}_5+\text{H}$ and $\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_3$ in the low- (k_0) and high-pressure (k_∞) limits. A comparison with theoretical data presented in the literature revealed a significant scatter of the k_0 and k_∞ values used in the numerical simulation of propene pyrolysis. A comparison of the calculation results with the published experimental data on the yield of H atoms behind reflected shock waves made it possible to determine the Troe's parameters for calculating the rate constants of both channels in the fall-off region at temperatures from 1300 to 2000 K.

Изучение кинетики термического разложения пропена представляет большой интерес, что обусловлено его широким применением в производстве различных химических соединений. Рациональный подход в подобных научных исследованиях требует численного моделирования с использованием детальных кинетических механизмов (ДКМ), в которых важнейшими являются первичные стадии распада пропена. Анализ литературных данных показал большой разброс значений констант скорости двухканального распада пропена, что приводит к невозможности удовлетворительного численного описания выхода атомов Н, наблюдаемых в экспериментах [1, 2].

В рамках теории РРКМ [3] были определены значения констант скорости двух каналов распада пропена с образованием $\text{aC}_3\text{H}_5+\text{H}$ (1) и $\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_3$ (2) в пределах низких (k_0) и высоких (k_∞) давлений. Из сопоставления этих результатов с экспериментальными данными [1, 2] были определены параметры Трое [4] для констант скорости каждого из каналов в переходной области по давлению в диапазоне температур 1300 – 2000 К. Численное моделирование экспериментально наблюдаемого выхода атомов Н, измеренного методом абсорбционной атомной спектроскопии [1, 2], проводилось с помощью программного модуля [5] с использованием модифицированного ДКМ [6], учитывающего новые значения констант скорости каналов (1) и (2). Результаты расчетов показали хорошее описание данных [1, 2] при давлении 2 атм в диапазоне температуры 1340–1910 К в смесях 0.5 – 9 *ppm* пропена в Аг.

Список литературы

1. Burke S.M., Burke U., Mc Donagh R., et al // Combust. Flame. 2015. V. 162. P. 296
2. Weber I., Golka L., Olzmann M. // Proceed. Combust. Symp. 2017. V. 36(1). P. 299
3. Кузнецов Н.М. Кинетика мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1982.
4. Baulch D.L., Bowman C.T., Cobos C.J. et al. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2005. V. 34. № 3. P. 757.
5. CHEMKIN-Pro 15112, Reaction Design: San Diego, CK-TUT-10112-1112-UG-1, 2011.
6. Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. // Acta Astronautica. 2020. V. 176. P. 653