

УДК 536.24

Публикуются тезисы докладов, представленных на Третий Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации (11–14 ноября 2013 г.). Доклады посвящены актуальным проблемам динамики и элементарных процессов в системах с ударными волнами, химическими и фазовыми превращениями, рассматриваются вопросы диагностики быстропротекающих процессов и вычислительной газодинамики.

**Редакционная коллегия:**

чл.-корр. НАН Беларуси О.Г. Пенязьков

канд. физ.-мат. наук А.Д. Чорный

ISBN 978-985-6456-89-6

© Институт тепло- и массообмена  
имени А.В. Лыкова НАН Беларуси,  
2013

УДК 535.71

## ДЕТАЛЬНЫЙ КИНЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ОКИСЛЕНИЯ Н-ГЕКСАДЕКАНА С УЧЕТОМ ОБРАЗОВАНИЯ ИЗОМЕРОВ И АРОМАТИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ

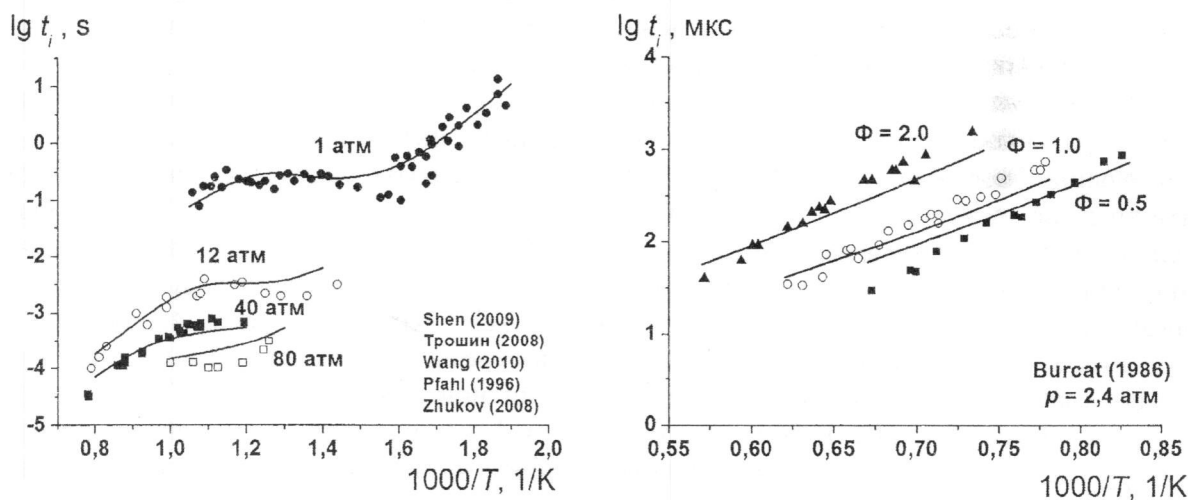
В.Я. Басевич<sup>1</sup>, А.А. Беляев<sup>1</sup>, П.А. Власов<sup>1,2</sup>, С.Н. Медведев<sup>1</sup>, С.М. Фролов<sup>1,2</sup>,  
Ф.С. Фролов<sup>1</sup>, А.Н. Гоц<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Центр импульсно-детонационного горения,  
Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup> НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

<sup>3</sup> ВлГУ, Владимир, Россия

Начиная с 2005 г. в ИХФ РАН разрабатывается неэмпирический детальный кинетический механизм (ДКМ) окисления и горения моторных топлив [1, 2]. К настоящему времени получен и всесторонне проверен объединенный ДКМ окисления и горения н-гексадекана ( $n\text{-C}_{16}\text{H}_{34}$ ), этанола ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) и толуола ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$ ), позволяющий моделировать самовоспламенение и горение не только индивидуальных углеводородов  $\text{C}_1\text{--C}_{16}$ , но и их смесей, представляющих суррогаты моторных топлив. Объединенный механизм включает 276 химических компонентов, участвующих в 3307 элементарных реакциях. На рисунке представлены примеры сравнения расчетных (кривые) и измеренных (точки, литературные данные) задержек самовоспламенения смесей н-декан–воздух (слева) и бензол–кислород–аргон (справа) от температуры при разных давлениях и составах. Видно удовлетворительное согласие результатов. В дальнейшем планируется дополнить ДКМ механизмами образования сажи и оксидов азота.



Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (точки) задержек самовоспламенения смесей н-декан–воздух (слева) и бензол–кислород–аргон (справа) от температуры при разных давлениях и коэффициентах избытка горючего

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 11-08-01297, 11-08-01168 и 11-08-97548-р\_центр).

### Литература

1. Басевич В.Я., Веденеев В.И., Фролов С.М., Романович Л.Б. Неэкстенсивный принцип построения механизмов окисления и горения нормальных алкановых углеводородов: переход от  $\text{C}_1\text{--C}_2$  к  $\text{C}_3\text{H}_8$  // Химическая физика. 2006. Т. 25, № 11. С. 87–96.
2. Басевич В.Я., Беляев А.А., Посвянский В.С., Фролов С.М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от  $\text{C}_1\text{--C}_{10}$  к  $\text{C}_{11}\text{--C}_{16}$  // Химическая физика. 2013. Т. 32, № 4. С. 87–96.