

О РОЛИ РАДИКАЛОВ C_2O В МЕХАНИЗМЕ ОБРАЗОВАНИЯ «БЫСТРОГО» NO

А. А. Коннов

Технический университет Эйндховена, 5600 MB Эйндховен, Нидерланды, akonnov@vub.ac.be

Проведено сопоставление литературных данных по измерению концентрации NO в послепламенной зоне смесей различных углеводородов с O_2 и N_2 при стандартной температуре и атмосферном давлении с результатами моделирования с использованием оригинального механизма Коннова и этого же механизма, дополненного реакцией C_2O с N_2 . Исследование роли этой последней реакции, предложенной Вильямсом и Флемингом [Proc. Combust. Inst. 2007. V. 31. P. 1109–1117], показало, что она является рациональным дополнением механизма образования «быстрого» NO. Из непосредственного сопоставления результатов измерений в различных пламенах и моделирования убедительно определен верхний предел константы скорости этой реакции: $k = 7 \cdot 10^{11} \exp(-17000/RT)$ [см³/(моль·с)].

Ключевые слова: пламя, углеводороды, образование оксидов азота.

ВВЕДЕНИЕ

Вильямс и Флеминг в работе [1] предложили несколько модификаций детального механизма горения легких углеводородов Коннова [2], относящихся к формированию «быстрого» NO. Они представили профили концентраций NO и CH, измеренные методом лазерно-индуцированной флуоресценции в пламенах метана и пропана при давлении 10 Торр, и привели аргументы в пользу того, что точное предсказание образования NO в этих и других пламенах, представленных в литературе, не может быть достигнуто в предположении, что единственным предшественником «быстрого» NO является радикал CH. Авторы [1] предположили, что NCN и «родственные» частицы образуются в реакции $CH_2 + N_2$ аналогично образованию $NCN + H$ в реакции $CH + N_2$ и путем моделирования подтвердили необходимость включения реакций радикалов CH_2 и C_2O с N_2 в механизм образования NO.

Концентрации NO в послепламенной зоне смесей различных углеводородов с O_2 и N_2 при стандартной температуре и атмосферном давлении были измерены с помощью пробоотборников и сопоставлены с результатами моделирования по механизму Коннова [3–8]. В смесях метана с воздухом [3] и $CH_4 + O_2 + N_2$ с различным разбавлением $D = O_2/(O_2 + N_2)$ [4, 5] модель предсказывает слегка большие концентрации NO в бедных пламенах и слегка мень-

шие — в богатых. Но в целом согласие с экспериментом хорошее. В пламенах $C_2H_4 + O_2 + N_2$ с разбавлением $D = 0.15 \div 0.18$ [6] измерения хорошо согласуются с результатами работы [9]. В бедных пламенах этилена предсказания по механизму Коннова [2] находятся в хорошем согласии с экспериментом, а в богатых пламенах согласуются только качественно, однако с дефицитом концентрации NO около $10 \div 15$ ppm. Два кинетических механизма, GRI-Mech. 3.0 [10] и модифицированный детальный механизм Коннова, были сопоставлены с данными измерений в пламенах этана и воздуха [7]. Численные расчеты концентрации NO в бедных и стехиометрических пламенах хорошо соответствуют эксперименту. Модель GRI-Mech. 3.0 завышает концентрацию NO приблизительно на 30 ppm при стехиометрическом отношении 1.4. Предсказания модифицированного механизма Коннова в богатых пламенах ближе к эксперименту с занижением концентрации NO около 15 ppm. Сходное поведение этого механизма отмечено для смесей $C_2H_6 + O_2 + N_2$ с разбавлением $D = 0.15 \div 0.18$ [8].

Можно заключить, что в механизме Коннова есть некоторые неточности в модели формирования «быстрого» NO, значимость которых по-разному проявляется в пламенах метана и пламенах более тяжелых углеводородов, согласно выводам Вильямса и Флеминга [1]. Поэтому целью настоящей работы было исследование возможной роли реакции ра-