

МОЖЛИВІСТЬ ПРОЦЕСІВ КОНДЕНСАЦІЇ ПІД ЧАС ГОМОГЕННОГО ГОРІННЯ

Трегубов Д.Г., Крупський С.С.

Національний університет цивільного захисту України, Харків

Відомо, що у полум'ї на проміжних стадіях ланцюгового процесу окиснення утворюються пероксидні сполуки, у тому числі у вигляді полімероподібних структур [1]. За самозаймання вугілля, обмаслених матеріалів – утворення пероксидних комплексів відбувається за звичайних умов зберігання [1]. Схожим процесом є самопоширюваний високотемпературний синтез з тією різницею, що проміжні продукти процесу горіння для такого синтезу є кінцевими. Утворення у момент ініціювання горіння високомолекулярних пероксидних структур у вигляді димерів або полімерної сітки створює полегшені умови для процесів конденсації. У фронті полум'я тиск поступово збільшується до тиску вибуху (у 10 разів). Існує хоча б біомолекулярний шар горючої суміші у підготовчій зоні, який контактує з гарячою зоною реакції та знаходиться під впливом швидких молекул.

За таких умов $t_{\text{кип}}$ н-гексану, якщо спиратись на відому залежність від тиску [2], зросте з 341 К в 1,3 рази до 441 К. Близьку $t_{\text{кип}}$ має н-декан, тоді для н-гексану за димеризації можна очікувати зростання $t_{\text{пл}}$ з 178 К в 1,35 рази до 243 К. Тобто, пероксидні кластери як більш масивні структури, ніж вихідні молекули н-алканів, будуть мати більші характерні температури фазових переходів, що може створити умови для конденсаційних процесів у фронті полум'я. Точку роси необхідно розглядати для такої температури системи, коли концентрація пари дорівнює стехіометричній для горіння. За менших температур така пара буде конденсуватися. Стехіометрична температура є не набагато більшою за температуру спалаху $t_{\text{сп}}$, тому можна спиратися на неї.

Довжина конденсованого пероксидного кластеру н-гексану: як димер димерних структур з врахуванням пероксидних містків – 28, тоді $t_{\text{пл}} = 279$ К, $t_{\text{кип}} = 527$ К; для димерів тетрамерних структур довжина – 56, тоді $t_{\text{пл}} = 334$ К, $t_{\text{кип}} = 705$ К. Для пероксидних димерів відносно вихідних н-алканів $t_{\text{пл}}$ та $t_{\text{кип}}$ мають зрости у середньому в 1,5 рази, а для пероксидних тетрамерів – у 2,2 рази у «К».

Для н-алканів з $n_c = 1-20$ є співвідношення $T_{\text{кип}}/T_{\text{сп}} = 1,3-1,4$ (у «К»), тоді $t_{\text{сп}}$ (як індикатор горючих концентрацій точки роси) пероксидних димерів н-алканів буде 180–700 К, для тетрамерів – 300–1100 К, що відповідає температурі різних зон полум'я. З точки зору теорії конденсації можна оцінити товщину фронту полум'я. Різниця густин газової і рідкої фаз – 3 порядки. Стехіометрична концентрація горіння н-алканів вимагає 7 – 9 молекул повітря на 1 ланку вуглеводню, тобто шар суміші, у якому вистачить речовини для утворення цільної мономолекулярної плівки, має бути ще в 10 разів більш товстим. 10000 шарів молекул – це близько 0,01 мм, що відповідає дослідженій товщині фронту полум'я [20]. Тобто конденсаційна модель дозволяє описати процеси у полум'ї.

Література:

1. Тарахно О. В., Трегубов Д. Г., Жернокльов К. В., Коврегін В. В. Основні положення процесу горіння. Харків: НУЦЗ України, 2020. 408 с. URL: <http://repositc.nuczu.edu.ua/handle/123456789/11382>.

2. Search for Species Data by Chemical Name. NIST Chemistry WebBook. U.S. Department of Commerce. doi: 10.18434/T4D303.