

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

**ФИЗИКА ГОРЕНИЯ И ВЗРЫВА**

Выходит с января 1965 г.	Периодичность 6 номеров в год	Том 43, № 6	Ноябрь — декабрь 2007 г.
-----------------------------	----------------------------------	----------------	-----------------------------

СОДЕРЖАНИЕ

<b>Бунев В. А., Бакланов А. В., Намятов И. Г., Замашников В. В., Бабкин В. С.</b> Метод меченых атомов в численном моделировании процессов горения .....	3
<b>Махов Г. А.</b> Метод оценки абсолютной концентрации радикалов $C_2H_5$ и $H$ в диффузионном пламени углеводородов .....	13
<b>Ивлева Т. П., Мержанов А. Г.</b> Моделирование твердопламенного горения в термически и химически неоднородных средах .....	21
<b>Кирдяшкин А. И., Китлер В. Д., Саламатов В. Г., Юсупов Р. А., Максимов Ю. М.</b> Капиллярные гидродинамические явления в процессе безгазового горения .....	31
<b>Рашковский С. А.</b> Влияние перегрузок на агломерацию частиц алюминия при горении смесевых твердых топлив .....	40
<b>Струнин В. А., Федорычев А. В., Гунин С. В., Ключников А. Н., Милёхин Ю. М., Манелис Г. Б.</b> Механизм и закономерности горения смесевых твердых топлив с охладителем .....	51
<b>Кобяков В. П., Ковалёв Д. Ю.</b> Исследование фазового состава продуктов горения термитных смесей, модифицированных оксидом титана .....	61
<b>Коптелов А. А., Милёхин Ю. М.</b> Особенности термического разложения перхлората аммония, подвергнутого воздействию $\gamma$ -излучения .....	69
<b>Бабенко Ю. И.</b> Неполнота превращения в бегущей волне полимеризации при наличии теплоотвода .....	75
<b>Алукер Э. Д., Живов Е. А., Кречетов А. Г., Митрофанов А. Ю., Нурмухаметов Д. Р.</b> Влияние радиационной обработки на кинетику взрывной проводимости азидов тяжелых металлов .....	78
<b>Хомик С. В., Медведев С. П., Поленов А. Н., Гельфанд Б. Е.</b> Условия инициирования детонации при фокусировке ударных волн в горючей газовой смеси .....	84
<b>Васильев А. А.</b> Детонационные свойства синтез-газа .....	90

<b>Колесников С. А., Уткин А. В.</b> Неклассические режимы стационарной детонации в прессованном TNETB .....	97
<b>Пинаев А. В., Кочетков И. И.</b> Пузырьковая детонация — самоподдерживающаяся уединенная волна с энергосвободой .....	104
<b>Гавриленко Т. П., Николаев Ю. А.</b> Расчет процесса детонационно-газового напыления .....	112
<b>Каррера Э., Морелло В., Валлетти Д., Алгостино Ф.</b> Моделирование воздействия взрывной волны на летящий деформируемый самолет .....	121
<b>Алфавитный</b> указатель статей, опубликованных в 2007 г. ....	131
<b>Авторский</b> указатель .....	137

© Сибирское отделение РАН, 2007  
 © Ин-т гидродинамики СО РАН, 2007  
 © Ин-т химической кинетики  
 и горения СО РАН, 2007  
 © Ин-т теоретической и прикладной  
 механики СО РАН, 2007

## МЕТОД МЕЧЕНЫХ АТОМОВ В ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ

В. А. Бунев, А. В. Бакланов, И. Г. Намятов, В. В. Замашников,  
В. С. Бабкин

Институт химической кинетики и горения СО РАН, 630090 Новосибирск, bunev@kinetics.nsc.ru

Методом меченых атомов проведено численное исследование плоского ламинарного пламени богатых смесей водород — метан — воздух. Показано, что в околопредельной смеси водород имеет некоторое преимущество при окислении кислородом. С приближением к стехиометрическим составам это преимущество уменьшается и затем исчезает. Показано, что меченые добавки  $\text{H}_2\text{O}^*$  и  $\text{CO}_2^*$  участвуют в реакциях и метки из этих молекул уходят на другие продукты. Малые добавки  $\text{CH}_4^*$  в смеси полностью реагируют с образованием  $\text{HH}^*\text{O}$ ,  $\text{H}_2^*\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{HH}^*$ ,  $\text{H}_2^*$ . Приведены количественные данные по распределению меченых атомов в продуктах. Исследовано взаимодействие схем окисления водорода и метана. Показано, что при наличии ограничений на взаимодействие этих схем нормальная скорость пламени увеличивается в  $5 \div 7$  раз.

Ключевые слова: метод меченых атомов, численное моделирование, ламинарное пламя, ингибирование, селективность окисления, инертные добавки, сверхадиабатические температуры пламени.

Метод меченых атомов [1] оказался достаточно эффективным для изучения механизма химических реакций. Разработанный в прошлом веке М. Б. Нейманом с сотрудниками кинетический метод меченых атомов позволил установить последовательность превращений одних веществ в другие. Сущность этого метода состоит в том, что, добавляя в реагирующую систему в начальный или какой-либо другой момент времени то или иное вещество, меченное соответствующим изотопом, можно решить вопрос о том, какова действительная последовательность химического превращения веществ в данной реакции и какова скорость превращения исследуемых веществ в различные моменты времени по ходу реакции. Методом меченых атомов изучались многие химические процессы: холоднопламенное окисление бутана, механизм термического окисления метана, реакции окисления пропана, *n*-пентана, *n*-бутана, фотохимическое разложение гидроксида фенилртути  $\text{C}_6\text{H}_5\text{HgOH}$  в метиловом и этиловом спиртах, меченных дейтерием в гидроксильной группе, изотопные обмены и т. д. [1].

Численное моделирование процессов горения, распространения пламени, самовоспламенения и т. д. также позволяет использовать метод меченых атомов. Возможности метода меченых атомов в численном моделировании мо-

гут оказаться такими же продуктивными. Метод позволяет использовать метку не только в виде изотопа, но и меченый атом с теми же физическими и химическими характеристиками, что и немеченый атом. Простой вариант метода меченых атомов в численном моделировании использовался, например, в работе [2], в которой исследовалась роль добавки  $\text{CO}_2$  в пламя метана и было показано, что добавка  $\text{CO}_2$  участвует в реакциях и ее роль не сводится к роли инертного разбавителя. Рассматривались два варианта: а) добавлялась молекула  $\text{CO}_2$  и она участвовала в соответствующих реакциях; б) добавленная молекула  $\text{CO}_2$  была обозначена как  $\text{FCO}_2$  и она не участвовала в реакциях. Однако в этом простом варианте нельзя узнать судьбу самой молекулы  $\text{CO}_2$ : каким образом, с какой скоростью и в какие частицы перешли атомы из  $\text{CO}_2$ .

Цель настоящей работы — численное исследование методом меченых атомов вопросов, связанных с распространением плоского ламинарного пламени в богатых смесях водород — метан — воздух: возможность селективного окисления водорода в многокомпонентных системах, вклад каждого компонента в превышение максимальной температуры пламени этих смесей над равновесной, участие в реакциях добавок  $\text{H}_2\text{O}$  или  $\text{CO}_2$ , взаимодействие схем окисления водорода и метана, степень превращения