Calculation of Coefficients of Chemical Reactions in a Mixture of Propane and Air Heated by Microwave Discharge Plasma

Pavel Bulat, Maxim Renev, Konstantin Volkov

Baltic State Technical University, St Petersburg, 190005, Russia <u>dsci@mail.ru</u>

Abstract

The short residence time of the fuel mixture in the working chamber of the propulsion system at supersonic flow rates significantly complicates its ignition. One of the promising directions related to ensuring stable ignition of fuel mixtures in a wide range of speeds is the use of nonequilibrium plasma created, for example, using a microwave discharge. The practical implementation of this direction requires a detailed analysis of the plasma-chemical reactions occurring in the fuel mixture and finding the coefficients of the corresponding reactions. To find the coefficients of chemical reactions in a mixture of propane and air, the solution of the kinetic equation for the electron energy distribution function at a given amplitude and frequency of the external electric field is considered. Electrons are heated by a uniform electric field, collide with the components of the mixture, and perform elastic and inelastic collisions, which are taken into account in the form of the dependence of the reaction cross section on the kinetic energy of the electrons. The results obtained, processed in the form of dependences of the coefficients of chemical reactions on the parameters of the external electric field, are of interest for modeling the microwave discharge plasma used to ignite the fuel mixture.

Keywords: electronic energy distribution function, chemical reaction, reaction coefficient, propane-air mixture, impact cross section, microwave discharge.



Dependences of the electron energy distribution function on the electron energy for various amplitudes of the external electric field (kV/cm) at a medium pressure of 100 torr

УДК 532.529

Расчет коэффициентов химических реакций в смеси пропана и воздуха, нагреваемой плазмой СВЧ-разряда

П. В. Булат, К. Н. Волков, М. Е. Ренев

Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова, Россия, Санкт-Петербург, 190005, ул. 1я Красноармейская, 1/21

dsci@mail.ru

Аннотация

Малое время пребывания топливной смеси в рабочей камере двигательной установки при сверхзвуковых скоростях потока в существенной степени осложняет ее воспламенение. Одно из перспективных направлений, связанных с обеспечением устойчивого поджига топливных смесей в широком диапазоне скоростей, состоит в использовании неравновесной плазмы, созданной, например, при помощи СВЧ-разряда. Практическая реализация такого направления требует детального анализа плазмохимических реакций, протекающих в топливной смеси, и нахождения коэффициентов соответствующих реакций. Для нахождения коэффициентов химических реакций в смеси пропана и воздуха рассматривается решение кинетического уравнения для функции распределения электронов по энергиям при заданной амплитуде и частоте внешнего электрического поля. Электроны нагреваются однородным электрическим полем, сталкиваются с компонентами смеси, совершают упругие и неупругие соударения, которые учитываются в виде зависимости сечения реакции от кинетической энергии электронов. Полученные результаты, обработанные в виде зависимостей коэффициентов химических реакций от параметров внешнего электрического поля, представляют интерес для моделирования плазмы СВЧ-разряда, используемой для поджига топливной смеси.

Ключевые слова: функция распределения электронной энергии, химическая реакция, коэффициент реакции, пропано-воздушная смесь, сечение соударения, СВЧ-разряд.

1. Введение

Электронные пучки находят широкое применение для активации газов, в состав которых входят органические и химически активные компоненты, а также для инициирования горения и конверсии топлива, управления обтеканием тел при сверхзвуковых скоростях [1–4].

В работе [1] рассматривается применение электронного пучка для изменения параметров обтекания шара. Производится инжекция электронного пучка через сопло Лаваля при одновременном воздействии разряда на пропано-воздушную смесь. Дополнительное уменьшение времени воспламенения достигается при воздействии пучка электронов и внешнего электрического поля [5, 6]. Использование электронного пучка позволяет сократить время воспламенения смеси. В работе [2] обсуждается применение электронного пучка для создания эффективных условий активации воздуха и его дальнейшего использования при горении пропано-воздушной смеси. Результаты работы [2] показывают, что увеличение в горючей смеси атомарного кислорода на $0.1 \div 1$ % позволяет снизить время воспламенения до $1.5 \div 6$ раз. Появление колебательно- и электронно-возбужденных компонент улучшает процесс горения и снижает время воспламенения [7, 8]. Горение водорода в кислороде (водородная цепь) улучшается неравновесной плазмой путем дополнительных реакций диссоциации во-

дорода, кислорода, водородно-кислородных радикалов [9]. В углеводородах следует учитывать, что атомы водорода соединяются в молекулы водорода путем отрыва пары от углеводородов [10].

В неравновесной плазме, в которой основную роль играет горячий электронный газ, протекают реакции диссоциации, возбуждения, ионизации компонент при низкой температуре среды [9, 11], что значительно увеличивает скорость горения. Предварительная ионизация компонентов топлива, подаваемых в камеру сгорания, уменьшает задержку воспламенения и делает более благоприятным градиент температуры по длине камеры [12, 13].

Кинетическая схема процессов в разряде в водороде, описывающая наиболее важные процессы в плазме (возбуждение, ионизация, диссоциация, рекомбинация), рассматривается в работе [14]. Модель включает в себя предварительно подготовленные табличные файлы констант скоростей реакций под действием электронного удара, являющихся функциями локальной амплитуды СВЧ-поля. Для расчета этих констант используются функции распределения электронов по энергиям, полученные путем решения уравнения Больцмана для свободных электронов плазмы самосогласованным набором сечений для водорода [15].

Для описания плазменного и пучкового воздействия на пропано-воздушную смесь необходимо учитывать электрон-молекулярные, электрон-ионные и ион-ионные процессы, а также продукты воздействия быстрых электронов на молекулы пропана [16]. Наличие плазменных компонент изменяет концентрацию активных радикалов и скорости основных процессов. Для реализации моделей горения топливных смесей требуются константы скоростей химических реакций с участием компонент плазмы – электронов, положительных и отрицательных ионов, включая быстрые электроны, при их взаимодействии с нейтральными компонентами и между собой [17].

Для получения физически корректных результатов требуется учитывать значительное количество компонент и реакций. Например, для задачи нагрева чистого азота СВЧ-разрядом требуется учитывать не менее 56 реакций и 15 сортов компонент вместе с температурой среды, описывающей колебательные состояния азота при неравновесном возбуждении [18]. О сложности полноценного расчета плазмы в среде даже без топлива свидетельствует работа [19], в которой получены результаты согласованного расчета наносекундного межэлектродного разряда.

В работе [20] обсуждается модель горения керосина, в которой часть компонент (например, недолгоживущие радикалы) определяется табличными зависимостями, а не решаемыми уравнениями. Упрощенные модели химической кинетики обсуждаются в работе [21]. Коэффициенты скорости возбуждения и ионизации демонстрируют сильную зависимость от формы функции распределения электронной энергии. Такое поведение связывается с экспоненциальным уменьшением популяции электронов при энергиях, превышающих порог активации. Результаты работы [22] подтверждают, что при нагреве среды плазмой получение точных оценок требует учета значительного количества компонент и реакций.

Реализация моделей газодинамики горения и плазмодинамики существенно усложняется при большом количестве компонент и реакций. Уточнение вклада тех или иных реакций позволяет упростить реализацию сложных моделей. Решение сложных уравнений заменяется табличными или графическими результатами, готовыми к использованию в модели более высокого уровня, описывающей поджиг смеси и ее горение.

В неравновесной плазме при воздействии электрического поля распределение электронов по энергии значительно отличается от максвелловского из-за различных процессов, сопровождающих столкновения электронов. Профиль функции распределения оказывает существенное влияние на коэффициенты скорости плазмохимических реакций.

В данной работе рассчитываются зависимости коэффициентов химических реакций с электронным газом в пропано-воздушной смеси при известной мощности СВЧ-разряда. Соответствующие зависимости получаются при помощи решения кинетического уравнения Больцмана для функции распределения электронов по энергиям. Такой подход не только позволяет учесть параметры СВЧ-разряда, но и использовать полученные результаты в других исследованиях, связанных с поджигом пропано-воздушных топливных смесей, при дополнительном учете известных схем горения. Один из факторов новизны проведенных исследований заключается в выявленном преобладании скорости одних реакций над другими при заданных параметрах СВЧ-поля`.

2. Математическая модель

В случае классической молекулярной динамики существующее программное обеспечение и суперкомпьютеры позволяют исследовать системы с пространственными размерами до нескольких микрометров [20] или на временах до десятков микросекунд [21]. В случае квантовой молекулярной динамики при использовании суперкомпьютеров с повышенной связностью узлов доступны системы до тысяч атомов и времена до десятков пикосекунд [22].

Функция распределения электронов по скоростям (Electron Velocity Distribution Function, EVDF) или энергиям (Electron Energy Distribution Function, EEDF) играет важную роль при описании процессов в неравновесной плазме. Для нахождения функции распределения электронов решается кинетическое уравнение Больцмана. Расчеты проводятся для различных амплитуд электрического поля в среде с заданными сечениями реакций, среди которых учитываются реакции ионизации, диссоциации, возбуждения, прилипания.

2.1. Основные допущения

Плазма CBЧ-разряда является неравновесной. Реакции ионизации с повышением проводимости происходят за счет горячего электронного газа низкой плотности. Внешний источник питания является импульсным, и плазма не успевает перейти в равновесную стадию. Плазма образуется и приобретает устойчивое значение проводимости за время порядка нескольких микросекунд, после чего ее поддерживает. Сечения реакции задаются исходя из известных экспериментальных данных в табличном или графическом виде. Состояние электронного газа определяется локальной амплитудой электрического поля.

Для решения кинетического уравнения используются следующие допущения.

1. Предполагается однородность параметров электронного газа и внешнего электрического поля в пространстве.

2. Электрон-электронные соударения не учитываются. При концентрации электронов до 10²¹ 1/м³ (при давлении 1 бар степень ионизации составляет около 10⁻⁶) вероятность электрон-электронных соударений при заданных условиях значительно ниже вероятности взаимодействия электронов с компонентами среды.

3. Состав среды является постоянным. Плазменный поджиг топливной смести осуществляется за счет присутствия активных компонент, доля которых не превосходит 0.1 %. При таком изменении состава среды функция распределения электронной энергии практически не изменяется.

2.2. Плазмохимические реакции

Многие реакции с участием электронов и компонент среды имеют пороговый характер по энергии электронов (реакции не происходят с медленными электронами). При любой энергии электронов происходят упругие реакции соударения. Они вносят основной вклад в определение транспортных свойств электронного газа и сопротивления плазмы. Их учет обязателен также с математической точки зрения, поскольку коэффициент диффузии в пространстве энергии иначе принимает бесконечные значения в интервале энергий от нуля до минимальной пороговой энергии. Предполагая, что в плазме преобладают упругие столкновения, влияние неупругих столкновений (например, возбуждения и ионизации) на функцию распределения является незначительным, а функция распределения становится сферически симметричной. При упругих столкновениях с нейтральными компонентами изменяется направление движения электронов, но не их энергия из-за больших различий в массе электронов и атомов.

Важно учитывать реакции возбуждения компонент электронами – неупругие реакции с относительно небольшим значением пороговой энергии (порядка 1÷10 эВ). В электронном газе преобладающее количество электронов не обладает высокой энергией. Учет таких реакций приводит к получению в расчетах более холодного электронного газа, энергия которого расходуется на возбуждение компонент. Возбужденные компоненты излучают фотоны, вза-имодействие с которыми (при условии, что они обладают подходящей энергией) может приводить к диссоциации и ионизации молекул топливной смеси. На данном этапе фотохимические реакции не рассматриваются.

Электроны с энергией порядка 11 эВ и более могут ионизировать молекулы пропана, кислорода и азота. Таких электронов обычно мало относительно общего числа электронов. Реакции ионизации происходят гораздо реже, чем реакции упругого столкновения, реакции возбуждения и другие реакции с низким порогом энергии, однако для них делается исключение. При рассмотрении поджига и горения топливных смесей под действием плазмы они важны тем, что приводят к образованию активных компонент – ионов с потенциальной энергией 11 эВ и более. Такие компоненты самостоятельно вступают во взаимодействие с другими с обменом зарядом (если возможно выделение энергии в среду) и реакции рекомбинации. Ионная химия вносит заметный вклад в распад молекул углеводородов.

При решении задач плазменного поджига топливной смеси важно учитывать реакции диссоциации. Плазменная конверсия приводит к образованию более простых углеводородов из сложных и активных компонент. Диссоциация может происходить при участии медленных электронов и не образовывать заряженных компонент, но возможно протекание высокопороговых реакций диссоциативной ионизации.

Существуют компоненты (кислород, галогены), которые могут присоединять электроны с образованием отрицательных ионов, что приводит к понижению проводимости и невозможности зажигания плазмы при слабом внешнем электрическом поле. Молекулярный кислород в ходе реакции прилипания распадается на атомы, которые активнее реагируют с топливом.

Таким образом, для задач плазменного горения имеется необходимость учета реакций диссоциации, ионизации с участием электронов и компонент среды, количество которых относительно велико (для задачи плазменного поджига – это исходный состав среды в области плазмы), поскольку именно они отвечают за улучшение свойств горения. Требуется учитывать низкопороговые реакции, которые не способствуют горению, но позволяют получать более устойчивые и корректные, с физической точки зрения, решения.

2.3. Уравнения и расчетные соотношения

Для определения характеристик электронов и описания процессов с участием электронов в газорязрядной плазме используется функция распределения скоростей или энергий электронов. Для нахождения функции распределения электронов по скоростям применяется кинетическое уравнение Больцмана.

При отсутствии внешнего магнитного поля кинетическое уравнение Больцмана описывает эволюцию функции распределения $F(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$ в шестимерном фазовом пространстве и имеет следующий вид:

$$\frac{\partial F}{\partial t} - \frac{e}{m_e} (\mathbf{E} \cdot \nabla_{\boldsymbol{v}} F) = \Omega(F, F), \tag{1}$$

где *t* – время; $\mathbf{r} = (x, y, z)$ – вектор пространственных переменных; $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ – вектор скорости компоненты; *e* и *m_e* – заряд и масса электрона; **E** – напряженность внешнего электрического поля. Под $\Omega(F, F)$ понимается интеграл столкновений.

Макроскопические характеристики среды являются моментами функции распределения и находятся посредством интегрирования по всем возможным скоростям. Концентрация электронов, соответствующая упругим и неупругим взаимодействиям между компонентами, находится при помощи интегрирования функции распределения

$$n_e(\mathbf{r},t) = \iint F(\mathbf{v},\mathbf{r},t) \mathrm{d}\mathbf{v} \,\mathrm{d}\mathbf{r}$$

Для упрощения кинетического уравнения Больцмана (1) предполагается, что скорость дрейфа электронов много меньше их хаотической скорости. Функция распределения электронов по скоростям раскладывается в ряд по сферическим функциям (например, по полиномам Лежандра с выделением симметричной части, которая зависит только от величины скорости). Ряд обычно усекается после 2-го члена разложения, что приводит к двучленному приближению (two-term approximation). Учитывая сферическую симметрию, уравнение Больцмана упрощается и записывается для функции распределения электронной энергии.

Стационарное кинетическое уравнение Больцмана для однородного электронного газа в пространстве энергий имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(W \cdot F - D \frac{\partial}{\partial \varepsilon} F \right) = S, \tag{2}$$

$$\gamma = \sqrt{\frac{2|e|}{m_e}}, \quad W = -\gamma \varepsilon \widehat{\sigma_{cs}^{el}(\varepsilon)}, \quad D = \frac{\gamma}{3} \cdot \overline{\overline{E_{MW}^0}} Q \cdot \varepsilon + \frac{\gamma k_B T_g}{|e|} \varepsilon^2 \widehat{\sigma_{cs}^{el}(\varepsilon)}, \qquad N_g = \frac{p_g}{k_B T_g}, \quad \overline{\overline{E_{MW}^0}} = N_g E_{MW}, \quad \overline{\omega_{MW}} = N_g^{-1} \omega_{MW},$$

где є – энергия электронного газа; W и D – коэффициенты «дрейфа» и «диффузии» энергии электронного газа в пространстве энергии; S – суммарная скорость всех неупругих реакций; γ – квадратный корень из соотношения удвоенного заряда электрона к его массе; $\sigma_{cs}^{el}(\varepsilon)$ – суммарное сечение всех реакций упругих соударений; $\overline{E_{MW}^0}$ – приведенное электрическое поле (E_{MW} – электрическое поле в абсолютных единицах); $\overline{\omega_{MW}}$ – приведенная круговая частота электрического поля (ω_{MW} – круговая частота в абсолютных единицах); Q – эффективность воздействия переменного электрического поля; k_B – постоянная Больцмана; T_g , p_g и N_g – температура, давление и количественная плотность среды.

Выражения для сечений реакций:

$$\widehat{\sigma_{cs}^{el}(\varepsilon)} = \sum_{k} 2\left(\frac{m_e}{M_k}\right) \chi_k \sigma_{cs_k}^{el}(\varepsilon) , \quad \widehat{\sigma_{cs}^{tot}(\varepsilon)} = \sum_{k} \chi_k \sigma_{cs_k}^{\Box}(\varepsilon),$$

где M_k – масса компоненты-мишени сорта k для упругого соударения; χ_k – молярная доля компонент сорта k; $\widehat{\sigma_{cs}^{tot}(\varepsilon)}$ – суммарное сечение всех реакций; $\overline{\sigma_{csk}^{lot}(\varepsilon)}$ – сечение реакции k.

Скорость неупругих реакций

$$S = \sum_{k \neq el} S_k - \gamma \lambda \varepsilon^{1/2} F,$$

$$S_{k=ex} = -\gamma \chi_k \left[\varepsilon \sigma_{cs_k}^{\square}(\varepsilon) F(\varepsilon) - (\varepsilon + \Delta \varepsilon) \sigma_{cs_k}^{\square}(\varepsilon + \Delta \varepsilon) F(\varepsilon + \Delta \varepsilon) \right] \Big|_{k=ex},$$

$$S_{k=att} = -\gamma \chi_k \varepsilon \sigma_{cs_k}^{\square}(\varepsilon) F(\varepsilon) \Big|_{k=att},$$

$$S_{k=ion} = -\gamma \chi_k \Big[\varepsilon \sigma_{cs_k}^{\Box}(\varepsilon) F(\varepsilon) - (\varepsilon + \Delta \varepsilon) \sigma_{cs_k}^{\Box}(\varepsilon + \Delta \varepsilon) F(\varepsilon + \Delta \varepsilon) \Big] \Big|_{k=ion} \\ + \delta(\varepsilon) \gamma \chi_k \int_0^{\varepsilon_{\max}} \varepsilon \sigma_{cs_k}^{\Box}(\varepsilon) F(\varepsilon) d\varepsilon \Big|_{k=ion},$$

где S_k – скорость реакции k (возбуждения ex, прилипания att, ионизации *ion*); $\Delta \varepsilon$ – изменение энергии участвующего электрона в ходе реакции k; $\delta(\varepsilon)$ – дельта-функция, равная бесконечности при нулевой энергии (новый электрон рождается с нулевой кинетической энергией). Параметр λ – специальный нормировочный множитель для численного моделирования. Также специально введен параметр ε_{max} , равный 150 эВ, ограничивающий диапазон интегрирования функции распределения электронной энергии при моделировании.

Параметр *Q* вычисляется по формуле

$$Q = 2\sigma_{\rm cs}^{\widehat{tot}(\widehat{\epsilon})^2} \left[\sigma_{\rm cs}^{\widehat{tot}(\widehat{\epsilon})^2} + \gamma^{-1} \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \overline{\omega_{MW}} \right]^{-1}$$

Параметр у итеративно подбирается для удовлетворения условия нормировки

$$\int_0^{\varepsilon_{\max}} \varepsilon^{1/2} F(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon = 1$$

Граничные условия для функции распределения в пространстве энергий записываются в виде

$$\left.\frac{\partial F}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} = 0, \quad F|_{\varepsilon=\varepsilon_{\max}} = 0$$

В точке нулевой энергии конвективные и диффузионные потоки равняются нулю (отсутствие электронов с кинетической энергией, меньшей нуля). Количество электронов с бесконечной энергией равняется нулю (в численных расчетах бесконечная энергия заменяется на большое, но конечное значение).

В результате расчетов получаются нормированные транспортные коэффициенты, такие как коэффициенты подвижности $\overline{\overline{b_e}}$ и диффузии $\overline{\overline{D_e}}$. Их абсолютные величины:

$$b_e = N_g^{-1}\overline{b_e}, \qquad D_e = N_g^{-1}\overline{D_e}$$

3. Сечения столкновений

Для замыкания системы уравнений добавляются табличные и функциональные зависимости сечений реакций от кинетической энергии электронов. Схемы реакций с участием электронов приведены в таблице 1. Сечения реакций для молекул пропана взяты из работы [10], кислорода и азота – с сайта lxcat.net. Графические зависимости сечений реакций от энергии электронов приводятся в Приложении.

Таблица 1

Сечения соударений электронов с молекулами азота, кислорода и пропана (El – упругое соударение, Ex – возбуждение, I – ионизация, А –прилипание, D – диссоциация без образования зарядов)

N⁰	Схема	Тип	Порог, эВ
1	$e + N_2 \rightarrow e + N_2$	El	0
2	$e + O_2 \rightarrow e + O_2$	El	0
3	$e + C_3 H_8 \rightarrow e + C_3 H_8$	El	0
4	$e + N_2 \rightarrow e + N_2^*$	Ex	*
5	$e + O_2 \rightarrow e + O_2^*$	Ex	**
6	$e + N_2 \rightarrow 2e + N_2^+$	Ι	15.6

7	$e + O_2 \rightarrow 2e + O_2^+$	Ι	12.1
8	$e + 0_2 \rightarrow 2e + 0 + 0^+$	Ι	23.0
9	$e + C_3 H_8 \rightarrow 2e + C_3 H_8^+$	Ι	14.3
10	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_3H_7^+ + H$	Ι	14.32
11	$e + C_3 H_8 \rightarrow 2e + C_3 H_6^+ + H_2$	Ι	18.11
12	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_3H_5^+ + H_2 + H$	Ι	15.4
13	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_3H_4^+ + 2H_2$	Ι	16.3
14	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_3H_3^+ + 2H_2 + H$	Ι	19.0
15	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_3H_2^+ + 3H_2$	Ι	25.0
16	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_3H^+ + 3H_2 + H$	Ι	26.0
17	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_3^+ + 4H_2$	Ι	37.0
18	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_5^+ + CH_3$	Ι	13.9
19	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_5^+ + CH_2 + H$	Ι	13.5
20	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_5^+ + CH + H_2$	Ι	15.4
21	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_4^+ + CH_4$	Ι	14.2
22	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_4^+ + CH_3 + H$	Ι	14.2
23	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_4^+ + CH_2 + H_2$	Ι	14.2
24	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_4^+ + CH + H_2 + H$	Ι	14.2
25	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_3^+ + CH_4 + H$	Ι	17.5
26	$\mathbf{e} + \mathbf{C}_3 \mathbf{H}_8 \rightarrow 2\mathbf{e} + \mathbf{C}_2 \mathbf{H}_3^+ + \mathbf{C} \mathbf{H}_3 + \mathbf{H}_2$	Ι	24.6
27	$\mathbf{e} + \mathbf{C}_3 \mathbf{H}_8 \rightarrow 2\mathbf{e} + \mathbf{C}_2 \mathbf{H}_3^+ + \mathbf{C} \mathbf{H}_2 + \mathbf{H}_2 + \mathbf{H}$	Ι	33.0
28	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_3^+ + CH + 2H_2$	Ι	28.7
29	$\mathbf{e} + \mathbf{C}_3 \mathbf{H}_8 \rightarrow 2\mathbf{e} + \mathbf{C}_2 \mathbf{H}_2^+ + \mathbf{C} \mathbf{H}_4 + \mathbf{H}_2$	Ι	21.4
30	$\mathbf{e} + \mathbf{C}_3 \mathbf{H}_8 \rightarrow 2\mathbf{e} + \mathbf{C}_2 \mathbf{H}_2^+ + \mathbf{C} \mathbf{H}_3 + \mathbf{H}_2 + \mathbf{H}$	Ι	21.4
31	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H_2^+ + CH_2 + 2H_2$	Ι	21.4
32	$\mathbf{e} + \mathbf{C}_3 \mathbf{H}_8 \rightarrow 2\mathbf{e} + \mathbf{C}_2 \mathbf{H}^+ + \mathbf{C} \mathbf{H}_4 + \mathbf{H}_2 + \mathbf{H}$	Ι	23.1
33	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H^+ + CH_3 + 2H_2$	Ι	23.1
34	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2H^+ + CH_2 + 2H_2 + H$	Ι	23.1
35	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2^+ + CH_2 + 3H_2$	Ι	39.0
36	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C_2^+ + CH_4 + 2H_2$	Ι	39.0
37	$e + C_3 H_8 \rightarrow 2e + CH_3^+ + C_2 H_5$	Ι	23.0
38	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + CH_3^+ + C_2H_4 + H$	Ι	23.0
39	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + CH_3^+ + C_2H_3 + H_2$	Ι	20.0
40	$\mathbf{e} + \mathbf{C}_3 \mathbf{H}_8 \rightarrow 2\mathbf{e} + \mathbf{C}\mathbf{H}_3^+ + \mathbf{C}_2\mathbf{H}_2 + \mathbf{H}_2 + \mathbf{H}_3$	Ι	32.1
41	$e + C_3 H_8 \rightarrow 2e + CH_2^+ + C_2 H_6$	Ι	21.0
42	$e + C_3 H_8 \rightarrow 2e + CH_2^+ + C_2 H_5 + H$	Ι	21.0
43	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + CH_2^+ + C_2H_4 + H_2$	Ι	21.0
44	$e + C_3 H_8 \rightarrow 3e + C_3 H_4^{2+} + 2H_2$	Ι	47.6
45	$e + C_3 H_8 \rightarrow 3e + C_3 H_3^{2+} + 2H_2 + H$	Ι	40.0

Таблица 1 (Продолжение)

46	$e + C_3 H_8 \rightarrow 3e + C_3 H_2^{2+} + 3H_2$	Ι	40.1
47	$e + C_3H_8 \rightarrow 3e + C_3H_5^+ + H_2 + H$	Ι	34.4
48	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C^+ + C_2H_6 + H_2$	Ι	37.0
49	$e + C_3H_8 \rightarrow 2e + C^+ + C_2H_4 + 2H_2$	Ι	37.0
50	$e + 0_2 \rightarrow e + 0 + 0^-$	А	0
51	$e + C_3 H_8 \rightarrow C_3 H_8^-$	А	0
52	$e + C_3 H_8 \rightarrow e + C_3 H_7 + H$	D	5.8
53	$e + C_3 H_8 \rightarrow e + C_3 H_6 + H_2$	D	2.7
54	$e + C_3H_8 \rightarrow e + C_3H_4 + 2H_2$	D	4.3
55	$e + C_3 H_8 \rightarrow e + C_2 H_6 + C H_2$	D	5.7
56	$e + C_3 H_8 \rightarrow e + C_2 H_5 + C H_3$	D	5.1
57	$e + C_3 H_8 \rightarrow e + C_2 H_4 + C H_4$	D	2.1

Таблица 1 (Продолжение)

^{*}Порог (эВ) – 0.29, 0.57, 0.85, 1.13, 1.41, 1.68, 1.95, 2.21, 2.47, 2.73, 2.98, 3.23, 3.47, 3.72, 3.96, 6.20, 6.73, 7.36, 7.74, 8.05, 8.22, 8.40, 8.45, 8.73, 8.95, 8.98, 9.20, 9.56, 9.59, 9.67, 9.93, 10.17, 10.54, 11.19, 11.88, 12.29, 12.77, 12.95, 13.00, 13.10, 13.17, 13.37, 13.38, 13.56, 14.00, 14.20. **Порог (эВ) – 0.02, 0.19, 0.39, 0.58, 0.77, 0.98, 1.63, 4.50, 6.10, 8.40, 9.30.

Упругие реакции имеют сечения реакций порядка $10^{-20} \div 10^{-19}$ м² в диапазоне энергий 0–100 эВ. Реакции возбуждения имеют резонансный характер, а сечения достигают значений $10^{-21} \div 10^{-20}$ м², но в узких диапазонах энергий. Сечения ионизации не равны нулю при энергии 11, 12, 15 эВ для пропана, кислорода и азота соответственно, и пропан проще всего ионизировать (значительное количество возможных реакций ионизации с диссоциацией с образованием различных частей пропана), достигаются значения $10^{-20} \div 10^{-19}$ м². Из-за высоких порогов энергии они происходят реже, чем реакции возбуждения.

Наибольшее сечение реакции ионизации имеет реакция с образованием отдельного атома водорода и иона радикала пропана $C_3H_7^+$. Отметим, что чем больше в ходе реакции ионизации отрывается углерода и водорода от пропана, тем реже такая реакция происходит. Имеется возможность ими пренебречь и не увеличивать количество рассматриваемых компонент и реакций.

В смеси преобладают упругие столкновения электронов. Их типичные значения находятся в интервале $10^{-20} \div 10^{-19}$ м². При этом упругие столкновения не имеют порога по энергии электронов и происходят даже с медленными электронами. Как правило, в электрической плазме при высоком давлении функция распределения электронной энергии имеет значения в области высоких энергий на порядок меньше, чем в области низких энергий. Иными словами, электронов с большой кинетической энергией (единицы эВ и более) на порядок меньше, чем с небольшой.

Сечения возбуждения азота и кислорода имеют характерные значения 10^{-20} м². При этом у них есть пороги начала реакций. Для пропана данные о сечении возбуждения в литературе не найдены. Неупругие соударения возбуждения, а также соударения с ионизацией и диссоциацией происходят только с быстрыми электронами, получившими достаточно энергии извне (например, за счет действия электрического поля), поэтому подобные реакции происходят гораздо реже.

Молекула пропана превосходит по размерам молекулы азота или кислорода, поэтому у нее больше сечение ионизации. При этом порог ионизации имеет порядок 11 эВ, в то время как для кислорода и азота они равняются 12.1 и 15.6 эВ соответственно. Небольшое снижение порога ионизации может привести к увеличению коэффициента реакции на порядок из-за большего количества электронов с меньшей энергией.

Сечения диссоциации имеют максимальные значения, сопоставимые с сечениями ионизации, но низкие пороги (2÷5 эВ против 11 эВ и более). Реакции диссоциации без ионизации идут интенсивнее по сравнению с реакциями ионизации. При таких реакциях диссоциации образуются радикалы пропана, пропена, пропина, метана, отдельные атомы и молекулы водорода. Подобные реакции диссоциации являются одним из основных каналов интенсификации плазменного поджига и горения. При ионизации молекулы пропана чаще всего происходит отрыв от молекулы одного атома водорода за один акт соударения. Ионизация без диссоциации происходит реже. Заметный вклад в ионизацию также вносят столкновения электронов с отрывом одной молекулы водорода, молекулы метана и его радикалов. Вклад реакций двойной ионизации при одном акте ионизации является пренебрежимо малым.

Электроны наиболее часто вступают в реакции упругих соударений с пренебрежимо малой потерей кинетической энергии, реже – в реакции возбуждения молекул воздуха и диссоциации пропана, и еще реже – в реакции ионизации. Несмотря на то, что реакции ионизации происходят реже, они обеспечивают поддержание и развитие плазмы. Предполагается, что допустимо пренебрежение реакциями ионизациями с порогом более 15.6 эВ и с сечениями реакций не более 10⁻²¹ м².

4. Численный метод

Для численного решения уравнения (2) строится сетка из 3000 линейных элементов в пространстве энергии от 0 до 150 эВ с коэффициентом увеличения размера элемента 10. Итеративно подбирается стационарное распределение электронов по энергии таким образом, чтобы полный источник электронной энергии и потоки в пространстве энергии равнялись нулю. Итеративный процесс начинается с максвелловского распределения со средней энергией 2 эВ. Последовательность приближений выполняется по методу Ньютона – Рафсона до тех пор, пока не достигается заданный уровень невязки 10^{-8} .

Уравнение (2) решается для приведенных амплитуд и частот электрического поля. В результате получаются приведенные транспортные свойства электронов. Приведенные характеристики инвариантны относительно изменения количественной плотности компонент среды. После окончания расчетов производится пересчет приведенных свойств электронов для получения их абсолютных значений.

5. Результаты расчетов

Решается кинетическое уравнение (2) для функции распределения электронной энергии с учетом реакций упругих соударений, возбуждения, диссоциации, ионизации, прилипания. Электронный газ нагревается внешним СВЧ-полем. Рассматривается смесь пропана с кислородом и азотом в соотношении 1:12:48. Температура среды составляет 150 К, а давление – 100 торр. Для иных условий среды можно пересчитать получаемые зависимости от электрического поля, используя выражения (3). Длина волны СВЧ излучения полагается равной 12.5 см. Амплитуда электрического поля изменяется. В результате получаются зависимости коэффициентов реакций с электронами от амплитуды внешнего СВЧ-поля.

Формула для расчета коэффициентов реакций по заданным сечениям и функции распределения энергии электронов имеет вид

$$k_{ei} = \gamma \int_0^{\varepsilon_{\max}} \varepsilon \sigma_{cs_i}^{\square}(\varepsilon) F(\varepsilon) d\varepsilon$$

Эти коэффициенты могут быть умножены на концентрацию электронов и соответствующей компонент для вычисления реакций с их участием.

Нагрев электронного газа происходит до температуры, при которой его тепловой баланс равен нулю (мощность нагрева равна потерям на реакции).

Рассмотрим изменение функции распределения при увеличении амплитуды внешнего электрического поля (рис. 1). При увеличении амплитуды поля увеличивается мощность нагрева электронного газа, и функция распределения становится шире, а ее амплитуда уменьшается (увеличивается доля электронов с высокой энергией за счет уменьшения доли тех, у которых энергия меньше). При увеличении напряженности электрического поля (выше 10 кВ/см) плотность электронов с энергией около 10 эВ в пространстве энергии оказывается сопоставимой с плотностями электронов с меньшей энергией. При такой амплитуде внешнего поля увеличивается интенсивность реакций ионизации. Функция распределения становится пологой также потому, что не учитываются электрон-электронные соударения, заметные при высоких плотностях электронного газа в плазме.



Рис. 1. Зависимости функции распределения энергии электронов от энергии электронов для различных амплитуд внешнего электрического поля (кВ/см) при давлении среды 100 торр

Электроны во внешнем электрическом поле разгоняются силой Кулона, приобретают кинетическую энергию и теряют ее при столкновениях с компонентами в плотной среде. Электроны в таком случае набирают скорость до определенного значения, определяемого произведением коэффициента подвижности и амплитуды внешнего электрического поля. При низкой амплитуде поля электроны, в основном, совершают упругие соударения, а при высокой – дополнительно еще и неупругие соударения, что снижает коэффициент подвижности ввиду большей потери кинетической энергии. На рис. 2 представлены зависимости транспортных коэффициентов электронов (подвижность и диффузия для электронов и их энергии) от амплитуды электрического поля.



Рис. 2. Зависимости транспортных коэффициентов электронов от амплитуды внешнего электрического поля

На рис. 3 приведены коэффициенты реакций упругих соударений для молекул кислорода, азота, пропана. Дополнительно приведен коэффициент реакции для столкновения с атомом кислорода. Несмотря на то, что для расчета горения такие коэффициенты не требуются, они приводятся для полноты описания решения кинетического уравнения. Молекулы пропана и азота примерно одинаково часто вступают в реакции упругих столкновений с электронами несмотря на то, что молекула пропана больше молекулы азота.



Рис. 3. Зависимости коэффициентов упругих столкновений компонент с электронами от амплитуды внешнего электрического поля

На рис. 4–10 приведены коэффициенты реакций диссоциации пропана и его диссоциативной ионизации. Для наглядности приводятся суммарные коэффициенты соответствующих типов реакций. Практически все рассматриваемые реакции диссоциации пропана без образования зарядов сопоставимы или больше по интенсивности, чем реакции диссоциативной ионизации. Поскольку при высоких амплитудах электрического поля функция распределения становится пологой, а коэффициенты реакций представляют собой интегралы от функции распределения, то ряд реакций, сечения у которых существенны в диапазоне высоких энергий, оказывается заметным на фоне остальных.



Рис. 4. Зависимости коэффициентов диссоциации пропана электронами от амплитуды внешнего электрического поля

Наиболее интенсивно происходят реакции диссоциации с отрывом молекулы водорода и метана (рис. 4). Реакции с отрывом атома водорода, нескольких молекул водорода и радикалов метана имеют на порядок меньшие коэффициенты реакции. В умеренных полях до 10 кВ/см для моделирования газодинамики горения наиболее важными являются реакции диссоциации с отрывом молекулы водорода и метана.

При высоких напряженностях электрического поля вклад реакций диссоциативной ионизации сравним с обычной диссоциацией. Среди реакций ионизации пропана наиболее важной является реакция ионизации с отрывом нейтрального атома водорода (рис. 5). Несколько менее интенсивной является реакция ионизации пропана без диссоциации. Ионы вступают в реакции обмена зарядом с выделением энергии и разрушением молекулярных связей.



Рис. 5. Зависимости коэффициентов диссоциативной ионизации пропана электронами (с образованием C₃H₅₋₈⁺) от амплитуды внешнего электрического поля

Реакции диссоциации пропана без образования зарядов сопоставимы или больше по интенсивности в электрических полях до 100 кВ/см, чем реакции диссоциативной ионизации. Представляется важным учет реакций диссоциативной ионизации с образованием C₂H_{4–5} (рис. 6). Их коэффициенты на порядок меньше, чем у коэффициента суммарной ионизации. В ходе таких реакций образуются радикалы метана, атомарный и молекулярный водород.



Рис. 6. Зависимости коэффициентов диссоциативной ионизации пропана электронами (с образованием C₃H₀₋₃⁺) от амплитуды внешнего электрического поля

Остальные реакции диссоциативной ионизации имеют коэффициенты реакций на два и более порядка меньше (рис. 7–9). В ходе этих реакций образуется сразу несколько молекул водорода и радикалы метана. Учет вклада этих реакций приводит в необходимости учета в кинетике горения пропановой смеси таких компонент, как C_3^+ , C_3H^+ . Для упрощения реализации вкладом таких реакций пренебрегается.



Рис. 7. Зависимости коэффициентов диссоциативной ионизации пропана электронами (с образованием C₂H₄₋₅⁺) от амплитуды внешнего электрического поля



Рис. 8. Зависимости коэффициентов диссоциативной ионизации пропана электронами (с образованием C₂H₂₋₃⁺) от амплитуды внешнего электрического поля



Рис. 9. Зависимости коэффициентов диссоциативной ионизации пропана электронами (с образованием $C_2H_{0-1}^+$ и C_{1-2}^+) от амплитуды внешнего электрического поля



Рис. 10. Зависимости коэффициентов диссоциативной ионизации пропана электронами (с образованием CH₂₋₃⁺) от амплитуды внешнего электрического поля

6. Заключение

Проведен комплекс исследований по выбору электрон-молекулярных процессов взаимодействия в пропано-воздушной смеси с учетом процессов возбуждения, ионизации, прилипания и отлипания. Для расчета констант скоростей реакций используется функция распределения электронов по энергиям, полученная при помощи решении уравнения Больцмана. Проведено решение кинетического уравнения для электронов в пространстве энергий. Электроны нагреваются внешним СВЧ полем с длиной волны 12.5 см, амплитуда которого варьируется в расчетах. Среда – смесь пропана, кислорода и азота с соотношением молярных долей 1:12:48. Электроны совершают упругие столкновения, участвуют в реакциях возбуждения, диссоциации и ионизации компонент среды. Сечения упругих столкновений и реакций для электронов задаются в табличном или в функциональном виде и берутся из внешних источников. Для различных амплитуд внешнего электрического поля рассчитаны функции распределения энергии электронов, транспортные коэффициенты, коэффициенты реакций.

Реакции ионизации пропана происходят интенсивнее, чем реакции ионизации молекул азота, кислорода. Существенный вклад в полную ионизацию пропана вносят реакции с отрывом одного атома или молекулы водорода, а также реакции с отрывом одного радикала метана и водорода одновременно. Подобные реакции приводят к заметной плазменной конверсии пропана и плазменному поджигу (вместе с диссоциацией молекулы кислорода). Реакции с отрывом сразу нескольких атомов и молекул водорода от пропана не учитываются. Отрыв двух-трех дополнительных молекул водорода не перевешивает тот факт, что коэффициент подобной реакции на два и более порядка меньше, чем полный коэффициент реакции ионизации.

Константы изменяются незначительно по сравнению с константами этих процессов в воздухе при концентрациях пропана меньше 10 %, что позволяет использовать константы скоростей электрон-молекулярных процессов, полученных для воздуха при расчете плазмы пропано-воздушной смеси при концентрациях пропана, имеющих практический интерес (бедные и стехиометрические смеси).

В расчетах на основе разработанного подхода не учитываются реакции фотоионизации. Плазменные эффекты без фотоионизации ожидаются менее интенсивными.

Зависимости коэффициентов реакций от амплитуды внешнего поля представляют интерес для моделирования прохождения СВЧ-излучения через область, занятую топливной смесью пропана с воздухом.

Приложение



Рис. 1П. Зависимости сечений упругих соударений электронов с молекулами азота, кислорода, пропана



Рис. 2П. Зависимости полных сечений возбуждения молекул азота, кислорода



Рис. 3П. Зависимости полных сечений ионизации молекул азота, кислорода, пропана



Рис. 4П. Зависимости частичных сечений ионизации молекулы пропана с ее диссоциацией до $C_3H_y^+$ ($y = 5 \div 8$)



Рис. 5П. Зависимости частичных сечений ионизации молекулы пропана с ее диссоциацией до $C_3H_y^+$ ($y = 0 \div 3$)



Рис. 6П. Зависимости частичных сечений ионизации молекулы пропана с ее диссоциацией до $C_2H_y^+$ ($y = 4 \div 5$)



Рис. 7П. Зависимости частичных сечений ионизации молекулы пропана с ее диссоциацией до $C_2H_y^+$ ($y = 2 \div 3$)



Рис. 8П. Зависимости частичных сечений ионизации молекулы пропана с ее диссоциацией до $C_2 H_v^+$ ($y = 0 \div 1$) и C_{1-2}



Рис. 9П. Зависимости частичных сечений ионизации молекулы пропана с ее диссоциацией до CH_y^+ ($y = 2 \div 3$)



Рис. 10П. Зависимости частичных сечений диссоциации молекулы пропана

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в ходе реализации проекта «Разработка фундаментальных и прикладных основ перспективных методов увеличения эффективности малоразмерных газотурбинных двигателей беспилотных летательных аппаратов и аэрокосмических транспортных систем, а также наземных энергетических установок», № FZWF-2024-004.

Литература

- 1. Klimov A., Bityurin V., Kuznetsov A., Tolkunov B., Vystavkin N., Vasiliev M. External and internal plasma-assisted combustion // AIAA Paper. 2004. No. 2004-1014.
- 2. Ardelyan N., Bychkov V., Gromov V., Kosmachevskii K. Application of two plasma ignition enhancement methods of propane-air mixture // AIAA Paper. 2006. No. 2006-0612.
- Chen Q., Ge J., Zheng T., Che X., Nie W. The role of non-equilibrium plasma kinetic effect on GCH4/GOX rocket engine combustion performance // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol. 1707. 012015.
- 4. Bulat P.V., Grachev L.P, Esakov I.I., Ravaev A.A., Volkov K.N. Microwave ignition of a combustible gas mixture under a critical streamer discharge in a high-speed flow // Acta Astronautica. 2023. Vol. 213. Pp. 614–626.
- 5. Булат П.В., Волков К.Н., Грачев Л.П., Есаков И.И., Бычков В.Л. Влияние пучка ускоренных электронов и внешнего электрического поля на горение пропан-воздушной смеси в дозвуковом потоке воздуха // Теплофизика высоких температур. 2023. Т. 61. № 6. С. 904–913.
- 6. Булат П.В., Волков К.Н., Грачев Л.П., Есаков И.И., Лавров П.Б., Ренев М.Е. Воздействие электронного пучка и внешнего электрического поля на пропано-воздушную смесь // Инженернофизический журнал. 2024. № 1. С. 111–117.
- 7. Bychkov V. L., Kochetov I.V., Bychkov D. V., Volkov S.A. Air-propane mixture ionization processes in gas discharges // IEEE Transactions on Plasma Science. 2009. Vol. 37. No.12. Pp. 2280–2285.
- 8. Zhou S., Nie W., Tian Y. High frequency combustion instability control by discharge plasma in a model rocket engine combustor // Acta Astronautica. 2021. Vol. 179. Pp. 391–406.
- Starikovskaia S.M. Plasma assisted ignition and combustion // Journal of Physics D: Applied Physics. 2006. Vol. 39. No. 16. Pp. R265–R299.
- 10. Janev R.K., Reiter D. Collision processes of C2,3Hy and C2,3Hy+ hydrocarbons with electrons and protons // Physics of Plasmas. 2004. Vol. 11. No. 2. Pp. 780–829.
- Feng R., Wang Z., Sun M., Wang H., Huang Y., Yang Y., Liu X., Wang C., Tian Y., Luo T., Zhu J. Multi-channel gliding arc plasma-assisted ignition in a kerosene-fueled model scramjet engine // Aerospace Science and Technology. 2022. Vol. 126. 107606.
- 12. Deng J., He L., Liu X., Chen Y. Numerical simulation of plasma-assisted combustion of methane-air mixtures in combustion chamber // Plasma Science and Technology. 2018. Vol. 20. No. 12. 125502.
- 13. Sharma A., Subramaniam V., Solmaz E., Raja L. Fully coupled modeling of nanosecond pulsed plasma assisted combustion ignition // Journal of Physics D: Applied Physics. 2019. Vol. 52. No. 9. 095204.
- 14. Лебедев Ю.А., Татаринов А.В., Титов А.Ю., Эпштейн И.Л. Двумерная модель неравновесного сильно неоднородного СВЧ-разряда во внешнем постоянном поле // Ученые записки Казанского университета. 2014. Т. 156. № 4. С. 120–132.
- Lebedev Yu.A., Epstein I.L., Yusupova E.V. Vibrational distribution of nitrogen molecules in the C3 u state in a near-surface microwave plasma in nitrogen at pressures of 1–5 Torr // Plasma Physics Reports. 2013 Vol. 39. No. 2. Pp. 183–187.
- 16. Смирнов Б.М. Комплексные ионы. Москва. Наука. 1983. 151 с.

- Bulat P.V., Melnikova A.I., Renev M.E., Volkov K.N. Development of mathematical model and numerical simulation of plasma ignition of flammable mixture with microwave subcritical streamer discharge // Acta Astronautica. 2023. Vol. 204. Pp. 711–719.
- 18. Saifutdinov A.I., Kustova E.V. Dynamics of plasma formation and gas heating in a focused-microwave discharge in nitrogen // Journal of Applied Physics. 2021. Vol. 129. No. 2. 023301.
- Bityurin V.A., Bocharov A.N., Dobrovolskaya A.S., Kuznetsova T.N., Popov N.A., Filimonova E.A. Numerical modeling of pulse-periodic nanosecond discharges // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 2100. No. 1. 012032.
- 20. Duboc B., Ribert G., Domingo P. Description of kerosene / air combustion with hybrid transported-tabulated chemistry // Fuel. 2018. Vol. 233. Pp. 146–158.
- 21. Zettervall N., Fureby C., Nilsson E.J.K. A reduced chemical kinetic reaction mechanism for keroseneair combustion // Fuel. 2020. Vol. 269. 117446.
- 22. Popov N.A., Starikovskaia S.M. Relaxation of electronic excitation in nitrogen/oxygen and fuel/air mixtures: fast gas heating in plasma-assisted ignition and flame stabilization // Progress in Energy and Combustion Science. 2022. Vol. 91. 100928.

References

- 1. Klimov A., Bityurin V., Kuznetsov A., Tolkunov B., Vystavkin N., Vasiliev M., External and internal plasma-assisted combustion, AIAA Paper 2004-1014. https://doi.org/10.2514/6.2004-1014
- 2. Ardelyan N., Bychkov V., Gromov V., Kosmachevskii K., Application of two plasma ignition enhancement methods of propane-air mixture, AIAA Paper 2006-0612.
- Chen Q., Ge J., Zheng T., Che X., Nie W., The role of non-equilibrium plasma kinetic effect on GCH4/GOX rocket engine combustion performance, *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1707, 012015. http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/1707/1/012015
- 4. Bulat P. V., Grachev L. P, Esakov I. I., Ravaev A. A., Volkov K. N., Microwave ignition of a combustible gas mixture under a critical streamer discharge in a high-speed flow, *Acta Astronautica*, 2023, vol. 213, pp. 614–626. http://dx.doi.org/10.1016/j.actaastro.2023.10.001
- 5. Bulat P. V., Volkov K. N., Grachev L. P., Esakov I. I., Bychkov V. L., Influence of an accelerated electron beam and external electrical field on combustion of propane-air mixture in a subsonic air flow, *High Temperature*, 2023, vol. 63, no. 6, pp. 830–839.
- 6. Bulat P. V., Volkov K. N., Grachev L. P., Esakov I. I., Lavrov P. B., Renev M. E., Action of an electron beam and an external electric field on a propane–air mixture, *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2024, vol. 97, no. 1, pp. 109–115.
- Bychkov V. L., Kochetov I. V., Bychkov D. V., Volkov S. A., Air-propane mixture ionization processes in gas discharges, *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2009, vol. 37, no.12, pp. 2280–2285. https://doi.org/10.1109/TPS.2009.2026755
- Zhou S., Nie W., Tian Y., High frequency combustion instability control by discharge plasma in a model rocket engine combustor, *Acta Astronautica*, 2021, vol. 179, pp. 391–406. https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2020.11.010
- 9. Starikovskaia S. M., Plasma assisted ignition and combustion, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2006, vol. 39, no. 16, pp. R265–R299. http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/39/16/r01
- 10. Janev R. K., Reiter D., Collision processes of C2,3Hy and C2,3Hy+ hydrocarbons with electrons and protons, *Physics of Plasmas*, 2004, vol. 11, no. 2, pp. 780–829. https://doi.org/10.1063/1.1630794
- Feng R., Wang Z., Sun M., Wang H., Huang Y., Yang Y., Liu X., Wang C., Tian Y., Luo T., Zhu J., Multi-channel gliding arc plasma-assisted ignition in a kerosene-fueled model scramjet engine, *Aero-space Science and Technology*, 2022, vol. 126, 107606. https://doi.org/10.1016/j.ast.2022.107606

- Deng J., He L., Liu X., Chen Y. Numerical simulation of plasma-assisted combustion of methane-air mixtures in combustion chamber, *Plasma Science and Technology*, 2018, vol. 20, no. 12, 125502. https://ui.adsabs.harvard.edu/link gateway/2018PIST...2015502D/doi:10.1088/2058-6272/aacdef
- Sharma A., Subramaniam V., Solmaz E., Raja L., Fully coupled modeling of nanosecond pulsed plasma assisted combustion ignition, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2019, vol. 52, no. 9, 095204. DOI: 10.1088/1361-6463/aaf690
- Lebedev Yu. A., Tatarinov A. V., Titov A. Yu., Epshtein I. L., Two-dimensional model of a nonequilibrium highly inhomogeneous microwave discharge in an external constant field, *Scientific Notes of Kazan University*, 2014, vol. 156, no. 4, pp. 120–132. [in Russian]
- Lebedev Yu. A., Epstein I. L., Yusupova E. V. Vibrational distribution of nitrogen molecules in the C3 u state in a near-surface microwave plasma in nitrogen at pressures of 1–5 Torr, *Plasma Physics Reports*, 2013, vol. 39, no. 2, pp. 183–187. http://dx.doi.org/10.1134/S1063780X13010029
- 16. Smirnov B. M., Complex ions, M.: Fizmatlit, 1983. [in Russian]
- Bulat P. V., Melnikova A. I., Renev M. E., Volkov K. N., Development of mathematical model and numerical simulation of plasma ignition of flammable mixture with microwave subcritical streamer discharge, *Acta Astronautica*, 2023, vol. 204, pp. 711–719. https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2022.09.015
- Saifutdinov A. I., Kustova E. V., Dynamics of plasma formation and gas heating in a focused-microwave discharge in nitrogen, *Journal of Applied Physics*, 2021, vol. 129, no. 2, 023301. http://dx.doi.org/10.1063/5.0031020
- Bityurin V. A., Bocharov A. N., Dobrovolskaya A. S., Kuznetsova T. N., Popov N. A., Filimonova E. A., Numerical modeling of pulse-periodic nanosecond discharges, *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 2100, no. 1, 012032. DOI: 10.1088/1742-6596/2100/1/012032
- 20. Duboc B., Ribert G., Domingo P., Description of kerosene/air combustion with hybrid transported-tabulated chemistry, *Fuel*, 2018, vol. 233, pp. 146–158. http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2018.06.014
- 21. Zettervall N., Fureby C., Nilsson E. J. K., A reduced chemical kinetic reaction mechanism for kerosene-air combustion, *Fuel*, 2020, vol. 269, 117446. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117446
- 22. Popov N. A., Starikovskaia S. M., Relaxation of electronic excitation in nitrogen/oxygen and fuel/air mixtures: fast gas heating in plasma-assisted ignition and flame stabilization, *Progress in Energy and Combustion Science*, 2022, vol. 91, 100928. https://doi.org/10.1016/j.pecs.2021.100928

Статья поступила в редакцию 14 мая 2024 г.