

Peculiarities of Soot Formation during Shock-Wave Pyrolysis of Ethylene

A. V. Eremin¹, M. R. Korshunova¹, E. Yu. Mikheyeva¹, V. N. Zolotarevko^{1,2}

¹ Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences,
Moscow, 125412, Russia

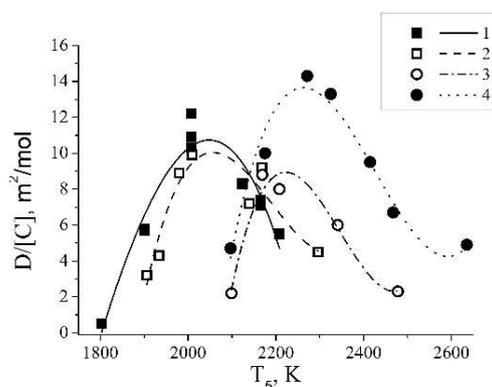
² Moscow Institute of Physics and Technology,
Dolgoprudny, 141700, Russia

mikheyeva@ihed.ras.ru

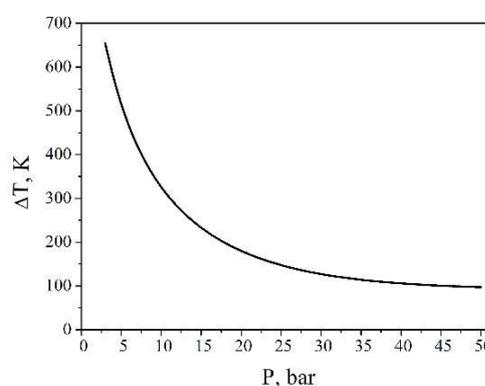
Abstract

In this paper, the peculiarities of soot formation at different pressures during ethylene pyrolysis in a shock tube were studied experimentally and numerically. The range of pressures of 6–26 bar and carbon concentrations of 2.8–3.8 mol/m³ was selected for investigation based on the analysis of literature data. Diagnostics of the soot formation process was carried out using the traditional laser extinction method. The effect of pressure on the soot yield and the magnitude of the temperature decrease was found. The analysis of the obtained data was carried out on the basis of numerical modeling using modern kinetic mechanisms of pyrolysis and oxidation of hydrocarbons. It is shown that a significant temperature decrease in the mixture found in the experiments is determined by the initial pyrolysis reactions, the contribution of which changes at different pressures.

Keywords: soot formation, carbon nanoparticles, ethylene pyrolysis.



Temperature dependences of optical density during pyrolysis of mixtures 1–4 with ethylene at a wavelength of 633 nm at the time of 1 ms. Points are experimental data, curves are approximations



Dependence of the maximum temperature drop at the time of 1 ms during ethylene pyrolysis with a 3.5 mol/m³ carbon atom concentration on pressure. Calculations were carried out using the CRECK kinetic mechanism

Compositions of the studied mixtures and experimental parameters

Mixture number	C ₂ H ₄ , %	<i>p</i> ₅ , bar	[C], mol/m ³
1	1.2	26.5	3.8
2	1.9	15.8	3.5
3	4	6.5	2.8
4	5.4	6.1	3.4

УДК 535.341

Особенности сажеобразования при ударно-волновом пиролизе этилена

А. В. Еремин¹, В. Н. Золотаренко^{1,2}, М. Р. Коршунова¹, Е. Ю. Михеева¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединенный институт высоких температур РАН,
Россия, Москва, 125412, ул. Ижорская, 13 стр. 2

² Московский Физико-Технический Институт
(Национальный Исследовательский Университет),
Россия, Московская область, Долгопрудный, 141700, Институтский переулок, 9
mikheyeva@ihed.ras.ru

Аннотация

В данной работе экспериментально и численно исследованы особенности сажеобразования при различных давлениях в процессе пиролиза этилена в ударной трубе. Диапазон давлений $6 \div 26$ бар и концентраций углерода $2.8 \div 3.8$ моль/м³ был выбран, исходя из анализа литературных данных. Диагностика процесса сажеобразования проводилась традиционным методом лазерной экстинкции. Обнаружено влияние давления на выход сажи и величину падения температуры. Анализ полученных данных проведен на основе численного моделирования с использованием современных кинетических механизмов пиролиза и окисления углеводородов. Показано, что существенное падение температуры смеси, обнаруженное в экспериментах, определяется начальными реакциями пиролиза, вклад которых изменяется при различных давлениях.

Ключевые слова: сажеобразование, углеродные наночастицы, пиролиз этилена.

1. Введение

Исследованию процесса сажеобразования посвящено огромное количество работ. В настоящее время активно развиваются расчетные методы, которые должны позволить предсказывать сажеобразование при различных условиях. Развиваются как подробные кинетические механизмы, состоящие из тысяч элементарных реакций [1], так и полуэмпирические подходы, имеющие успех в практических приложениях [2, 3]. Активно исследуются различные пути роста зародышей сажевых частиц через рост полиароматических углеводородов (ПАУ): НАСА, РАС, МАС и др. Альтернативным кинетическим путем, ведущим к образованию частиц сажи, является полимеризация молекул полиинов $C_{2n}H_2$ [4, 5]. Однако, этот путь образования зародышей сажи редко включают в современные кинетические механизмы.

Этилен часто используют как модельное топливо для исследования сажеобразования в пламенах [1, 6–8], хотя не всегда получаемые выводы можно распространить на практические приложения [3]. Экспериментальные данные, полученные при пиролизе углеводородов на ударных трубах, служат хорошим материалом для валидации кинетических механизмов при высоких температурах. Кроме того, в условиях ударно-трубного эксперимента в отличие от пламени возможно варьирование температуры, давления, концентрации и стехиометрии в широком диапазоне значений.

Сажеобразование при пиролизе этилена на ударных трубах ранее уже исследовалось в ряде работ [9–13]. В работе [9] проведено исследование выхода сажи при высоких давлениях $25 \div 110$ бар и больших концентрациях атомов углерода в смеси $4 \div 4.7$ моль/м³. Показано, что выход сажи увеличивается с увеличением давления при пиролизе этилена в отличие от

результатов для бензола и н-гексана. В работах [10–13] исследовали выход сажи при относительно низких давлениях $3 \div 5$ бар и концентрациях атомов углерода $0.7 \div 2.3$ моль/м³. В работе [11] показано увеличение выхода сажи с увеличением концентрации атомов углерода при постоянном давлении 4.25 бар. Экспериментальные данные подтверждаются результатами проведенного авторами кинетического моделирования выхода сажи. В работе [13] помимо диагностики сажеобразования проведены измерения температуры в течение 1.5 мс за отраженной ударной волной (ОУВ). Показано, что температура существенно падает относительно начальной температуры за ОУВ (T_5) вследствие начальных реакций пиролиза этилена. Результаты моделирования по механизму CRECK [1] согласуются с экспериментальными профилями температуры [13]. В работе [12] измерены размеры образующихся углеродных наночастиц при пиролизе этилена, показано, что их размеры не превышают 20 нм. Максимумы выхода сажи в работе [9] наблюдались при температуре 1850 К за ОУВ, а в работах [10–13] – при $2180 \div 2250$ К. Логично было бы предположить, что с увеличением концентрации атомов углерода в смеси увеличивается падение температуры в процессе пиролиза и максимум колокола выхода сажи смещается в сторону высоких температур T_5 . Однако, в случае этилена литературные данные показывают обратную тенденцию, что требует дополнительного исследования.

Целью данной работы являлось получить дополнительные экспериментальные данные по выходу сажи в переходной области давлений $6 \div 26$ бар и концентраций атомов углерода $2 \div 4$ моль/м³; обобщить литературные данные и найти закономерности в проведенных ранее исследованиях; разобраться с кинетическими особенностями сажеобразования при пиролизе этилена.

2. Эксперимент

Эксперименты проводились за отраженными ударными волнами (ОУВ) на ударной трубе стандартной конструкции в ОИВТ РАН. Сечение ударной трубы постоянное по длине с внутренним диаметром 50 мм. Длина камеры высокого давления (КВД) составляет 1.5 м, длина камеры низкого давления (КНД) составляет 3.5 м. В КНД напускалась исследовательская смесь давлением $P_1 = 70 \div 700$ мбар. В качестве диафрагм использовались отожженные алюминиевые фольги толщиной $0.15 \div 0.5$ мм. В КВД в качестве толкающего газа напускался гелий до самопроизвольного разрыва диафрагмы. Далее вследствие перепада давлений формировалась падающая ударная волна (ПУВ). В зависимости от типа и толщины диафрагмы, а также давления исследуемой смеси (P_1) варьировалась скорость ПУВ и соответственно параметры за ПУВ: давление (P_2) и температура (T_2). После отражение от торцевого фланца ОУВ повторно нагревала исследуемый газ до давления P_5 и температуры T_5 . Все измерения проводились за ОУВ. Длительность пробки ударной волны варьировалась в зависимости от параметров эксперимента и составляла не менее 1 мс. Исследовательское сечение, в котором перпендикулярно установлены 4 диагностических окна из кварцевого стекла диаметром 6 мм и один датчик давления, находится на расстоянии 45 мм от торцевого фланца. Система оптических измерений была синхронизована с датчиком давления, находившимся в исследовательском сечении. Параметры за ОУВ (T_5, p_5) рассчитывались по одномерной газодинамической теории без учета протекания химических реакций по измерению скорости падающей ударной волны (ПУВ). Скорость ПУВ измерялась с помощью пьезоэлектрических датчиков давления РСВ113В26. Погрешность измерения скорости ПУВ приводила к погрешности определения температуры за ОУВ в ± 25 К. Были исследованы смеси этилена с аргоном. Газовые смеси составлялись манометрическим способом и выдерживались в смесевом баллоне сутки до полного перемешивания. Количество углеводорода в смеси варьировалось в диапазоне $1.2 \div 5.4$ %. Составы исследованных смесей и диапазоны параметров за ОУВ представлены в табл. 1.

Метод лазерной экстинкции был использован для определения оптической плотности на длине волны 633 нм в течение времени ударно-трубного эксперимента ($\sim 1 \div 1.5$ мс). Данная длина волны традиционно используется для регистрации объемной доли конденсированной фазы при пиролизе углеводородов [14]. В качестве источника излучения использовался He-Ne лазер на длинах волн 633 нм, а в качестве детектора – Si фотодиод Thorlabs DET10A/M с узкополосным светофильтром. На рис. 1 представлены характерные экспериментальные сигналы давления и экстинкции в исследовательском сечении.

По измерениям экстинкции определялась относительная оптическая плотность среды D по следующему соотношению:

$$\frac{D}{[C]} = \frac{-\ln[I(t)/I_0]}{[C]l}, \quad (1)$$

где $I(t)$ – интенсивность излучения, прошедшего через среду; I_0 – интенсивность падающего излучения; $[C]$ – концентрация атомов углерода; l – длина оптического пути, равная внутреннему диаметру ударной трубы. Нормировка на концентрацию атомов углерода производилась для того, чтобы проводить сравнения в смесях, содержащих различное начальное количество атомов углерода.

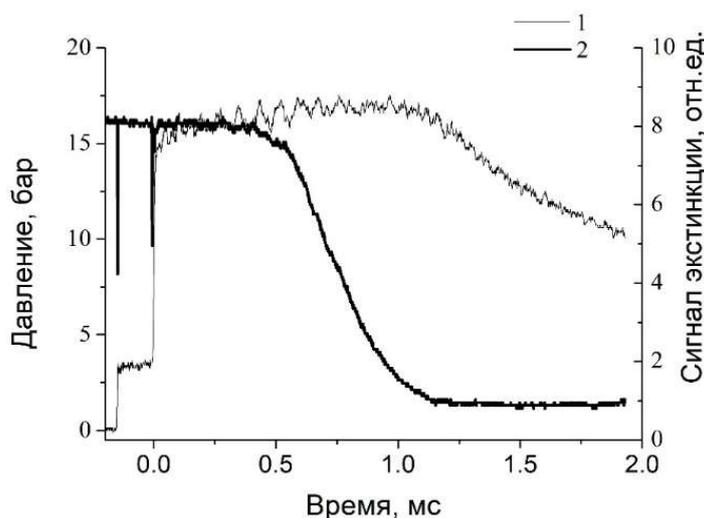


Рис. 1. Экспериментальные сигналы давления (1) и лазерной экстинкции (2) в исследовательском сечении, смесь 1.9% C_2H_4 + 98.1 % Ar, $T_5 = 1980$ К, $p_5 = 16.1$ бар

Объемная доля конденсированной фазы вычисляется по соотношению:

$$f_V = \frac{-\ln[I(t)/I_0]\lambda}{6\pi E(m)l}, \quad (2)$$

где l – длина волны лазерного излучения; $E(m)$ – функция, зависящая от коэффициента преломления света в среде $m = n + ik$ на данной длине волны, которая равна

$$E(m) = -\text{Im}\left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2}\right) = \frac{6nk}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + 4n^2k^2} \quad (3)$$

Некоторые исследователи предпочитают использовать схожую по физическому смыслу величину, называемую «выход сажи» (SY) – это отношение количества атомов углерода, сконденсировавшихся в частицы, к общему числу атомов углерода в системе

$$SY = \frac{-\ln[I(t)/I_0] \lambda}{6\pi E(m) l} \frac{\rho}{[C] M}, \quad (4)$$

где ρ – плотность углеродных частиц; M – молярная масса углерода.

Таким образом, оптическая плотность, объемная доля конденсированной фазы и выход сажи связаны следующим соотношением:

$$\frac{D}{[C]} = \frac{6\pi E(m) f_V}{\lambda [C]} = \frac{6\pi E(m) M}{\lambda \rho} SY \quad (5)$$

В табл. 1 представлены экспериментальные параметры, результаты измерений и данные из литературы. Литературные данные по измерениям экстинкции, представленные исходно в разных физических величинах, были пересчитаны в оптическую плотность, нормированную на концентрацию атомов углерода, в соответствие с выражением (5).

3. Моделирование

Численное моделирование проводилось в программе OpenSMOKE++ [15] и Cantera [16] с использованием кинетических механизмов CRECK [1], NUIGMech1.1 [17], AramcoMech3.0 [18], San Diego Mechanism [19]. Данные механизмы прошли валидацию для горения и пиролиза широкого спектра углеводородов. Механизм CRECK включает секционную модель образования крупных ПАУ и частиц сажи. Расчет проводился в 0-мерном приближении реактора постоянного объема, входными параметрами являлись температура, давление и состав смеси. Расчеты проводились в диапазоне температур 1200 ÷ 2400 К и давлений 3 ÷ 50 бар. В результате проведенных расчетов получены временные профили температуры и концентраций отдельных газофазных компонент в течение расчетного времени 1.5 мс.

Таблица 1

Составы исследуемых смесей, экспериментальные параметры и результаты измерений

№ смеси	C ₂ H ₄ , %	p ₅ , бар	[C], моль/м ³	D/[C] центр колокола, м ² /моль	T ₅ центр колокола, К	Момент измерений за ОУВ, мс	Источник
1	1.2	26.5	3.8	11	2050	1	данная работа
2	1.9	15.8	3.5	10	2050	1	данная работа
3	4	6.5	2.8	9	2225	1	данная работа
4	5.4	6.1	3.4	14	2250	1	данная работа
5	5	3.5	2.1	3.2	2250	1	[12]
6	0.6	50	4	23	1850	нет данных	[9]
7	0.75	50	4.7	26	1850	нет данных	[9]
8	1.2	25	4	15	1850	нет данных	[9]
9	0.3	110	4	29	1850	нет данных	[9]
10	1.5	4.25	0.7	0.4	2200	1.5	[11]
11	3	4.25	1.4	3.8	2200	1.5	[11]
12	5	4.25	2.3	13.4	2250	1.5	[11]
13	5	3	1.6	7	2250	1.5	[13]
14	3	5	1.6	3.5	2180	2	[10]

4. Результаты и обсуждение

На рис. 2 представлены измеренные в данной работе температурные зависимости оптической плотности на длине волны 633 нм при пиролизе смесей № 1–4 с этиленом к моменту 1 мс за ОУВ. Каждая точка – это отдельный эксперимент. Для всех смесей наблюдается хорошо известная колоколообразная зависимость от температуры.

На рис. 3 представлены максимальные значения оптической плотности в центре колокола в зависимости от концентрации атомов углерода в смеси. На данном рисунке представлены литературные данные из табл. 1 и результаты полученные в этой работе по оптической плотности на длине волны 633 нм при пиролизе смесей с этиленом. Экспериментальные данные в диапазоне концентраций атомов углерода $2.8 \div 3.8$ моль/м³ получены впервые. Температура за ОУВ, при которой наблюдался максимум выхода сажи для той или иной смеси, представлены в табл. 1.

Несмотря на нормировку полученных значений на концентрацию атомов углерода, наблюдается существенный рост оптической плотности при увеличении концентрации атомов углерода (рис. 3).

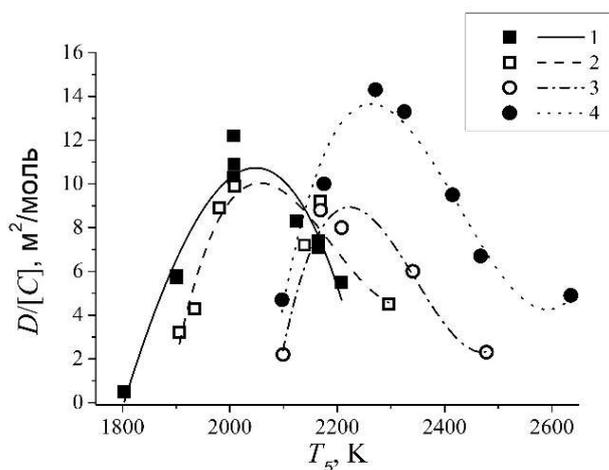


Рис. 2. Температурные зависимости оптической плотности при пиролизе смесей № 1–4 с этиленом на длине волны 633 нм на момент измерений 1 мс за ОУВ. Точки – экспериментальные данные, кривые – аппроксимация

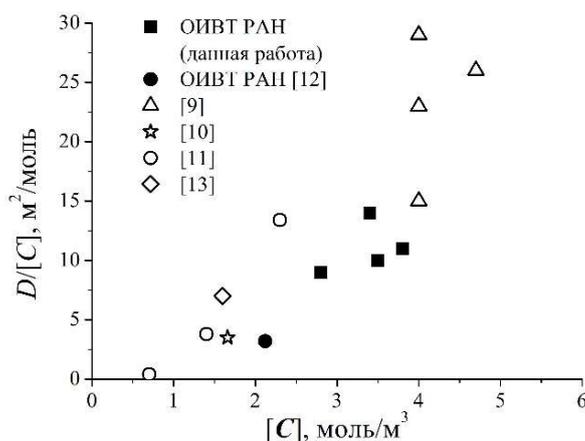


Рис. 3. Зависимость максимума оптической плотности при пиролизе смесей с этиленом от концентрации атомов углерода

Собранные данные получены на разных установках, при разных давлениях и временах измерения (1, 1.5, 2 мс за ОУВ). Эти обстоятельства, по всей видимости, приводят к некоторому разбросу точек на рисунке. Хорошо видно, что даже при небольшом увеличении исход-

ной концентрации атомов углерода в смеси при одинаковых давлениях и температурах существенно увеличивается оптическая плотность (или выход сажи). Это демонстрируют как наши эксперименты – серии 3 и 4 (пустые и наполненные круги на рис. 2), так и эксперименты [9] – серии № 6–7, [11] – серии № 10–12 и другие литературные данные, представленные на рис. 3.

Следующим шагом в анализе полученных данных явилось исследование зависимости оптической плотности от давления. В работе [9] результаты экспериментов по измерению выхода сажи при постоянной концентрации атомов углерода 4 моль/м^3 с варьированием давления в диапазоне $25 \div 110$ бар демонстрировали увеличение выхода сажи с давлением. По нашим данным при концентрации атомов углерода около 3.5 моль/м^3 в диапазоне давлений $6 \div 26$ бар нельзя отметить существенного изменения величины оптической плотности от давления (серии № 1, 2, 4 на рис. 2). Выборка литературных данных [10, 11, 13] с концентрацией атомов углерода около 1.5 моль/м^3 с варьированием давления в диапазоне $3 \div 5$ бар также не показывает расслоения по давлению. Таким образом, влияние давления на величину оптической плотности и выхода сажи при пиролизе этилена наблюдалась только в работе [9] при давлениях выше 25 бар.

Наиболее интересным результатом данной работы явилось наблюдений изменения температурной зависимости колоколов выхода сажи от давления. Как было показано на рис. 2, для смесей с одинаковой концентрацией атомов углерода, но разным давлением наблюдается сдвиг колоколов по температуре (см. серии № 1, 2, 4). При увеличении давления сдвиг колоколов в сторону большей температуры уменьшается существенно, при этом незначительно падает оптическая плотность (или выход сажи). Литературные данные (см. табл. 1) согласуются с этим выводом: при давлениях $3 \div 6$ бар максимум колокола находится при $T_5 \sim 2180 \div 2250 \text{ К}$ [10–13], а при давлениях $15 \div 110$ бар – $1850 \div 2050 \text{ К}$ [9]. Как отмечалось в работе [20], сдвиг максимума колокола оптической плотности в сторону высоких температур связан с падением температуры вследствие реакций пиролиза начальной смеси, содержащей углеводороды.

Для оценки наблюдаемого падения температуры проводилось кинетическое моделирование по механизмам CRECK, NUIGMech1.1, AramcoMech3.0 и SanDiego. На рис. 4, *a–c* представлены расчетные временные профили изменения температуры реагирующей газовой смеси при пиролизе этилена. T_0 – начальная температура в расчете – аналог T_5 (температура за ОУВ) в эксперименте. Расчеты произведены при постоянной концентрации атомов углерода 3.5 моль/м^3 . При одинаковой начальной T_0 наблюдается существенно разное падение температуры для смесей при давлениях 6 бар и 26 бар. Данную тенденцию демонстрируют все использованные кинетические механизмы. При $T_0 = 1800 \text{ К}$ разница между температурами при начальных давлениях 6 бар и 26 бар к моменту 1 мс составляет $100 \div 140 \text{ К}$, при 2100 К – $275 \div 310 \text{ К}$, при 2300 К – $300 \div 350 \text{ К}$.

Эти результаты расчетов более наглядно представлены на рис. 4, *d*, где приведены зависимости изменения температуры к моменту 1 мс относительно начальной температуры T_0 при разных давлениях. Расчеты выполнены по кинетическому механизму CRECK. Дополнительные расчеты по другим механизмам NUIGMech1.1, AramcoMech3.0, SanDiego показывают неплохое согласие друг с другом и с результатами, полученными с помощью CRECK (см. рис. 4, *a–c*). Поэтому на рис. 4, *d* представлены результаты, полученные с помощью CRECK. При $T_0 = 1200 \div 1400 \text{ К}$ изменения температуры относительно начальных условий не наблюдается, так как этилен практически не распадается. С увеличением начальной температуры увеличивается степень распада этилена (см. рис. 6, *a*) и наблюдается все более существенное изменение температуры (рис. 4). При более высоких температурах наблюдается полный распад начального топлива и дальнейшего изменения температуры не происходит, при этих условиях наблюдается максимальное падение температуры при данном давлении. Отметим, что в работе [13] было показано, что экспериментально измеренные временные профили температуры хорошо согласуются с рассчитанными кривыми по механизму CRECK.

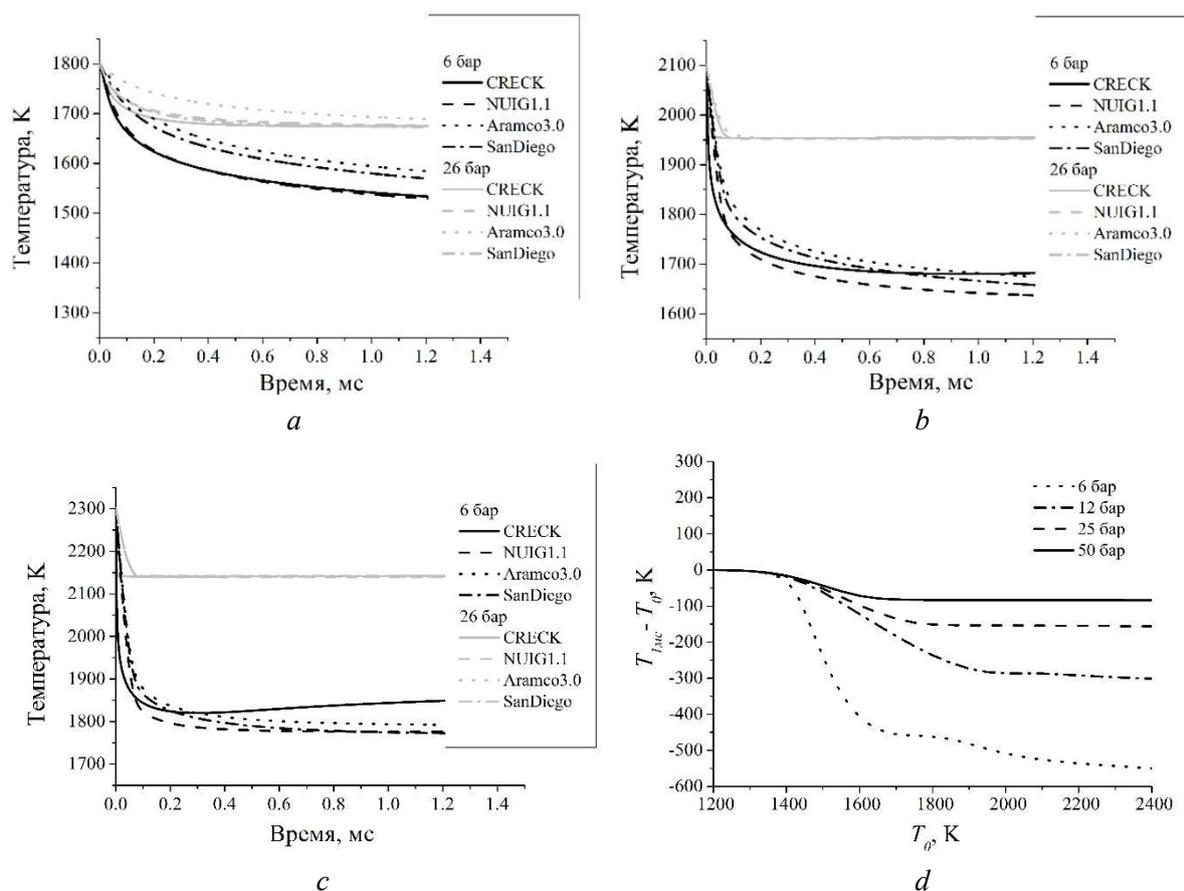


Рис. 4. Расчетные временные профили температуры при пиролизе этилена при давлениях 6 бар и 26 бар и концентрации атомов углерода в смеси 3.5 моль/м^3 при различных начальных температурах T_0 : 1800 К – (a), 2100 К – (b), 2300 К – (c); расчеты проведены по кинетическим механизмам: CRECK, NUIGMech1.1, AramcoMech3.0, SanDiego. Расчетное изменение температуры реагирующей газовой смеси к моменту времени 1 мс относительно начальной T_0 для разных давлений – (d); расчеты проведены по CRECK

На рис. 5 представлена расчетная зависимость максимального падения температуры (область плато на рис. 4, d) при пиролизе этилена с концентрацией атомов углерода в смеси 3.5 моль/м^3 в зависимости от давления.

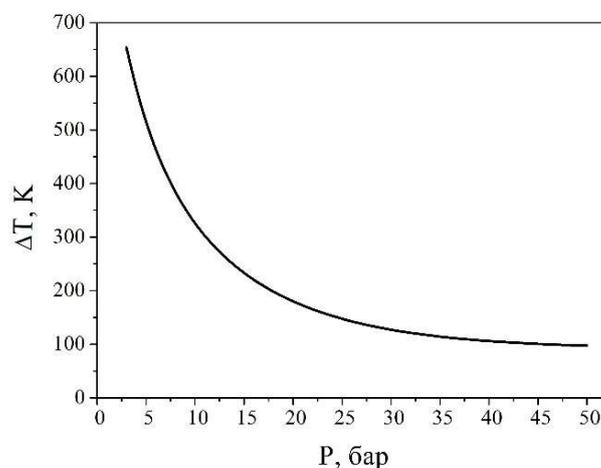


Рис. 5. Зависимость максимального падения температуры на момент времени 1 мс при пиролизе этиленом с концентрацией атомов углерода в смеси 3.5 моль/м^3 от давления. Расчеты проведены по кинетическому механизму CRECK

Максимальное падение температуры относительно начальной наблюдается при более низких давлениях. Данная зависимость падения температуры от давления объясняет наблюдаемый экспериментально сдвиг колокола оптической плотности (см. рис. 2).

Основные реакции, протекающие на начальной стадии пиролиза этилена:



Распад этилена проходит через образование ацетилена и винильного радикала R1–R2. Расчетные временные профили концентраций этилена, винильного радикала и ацетилена при разных температурах представлены на рис. 6.

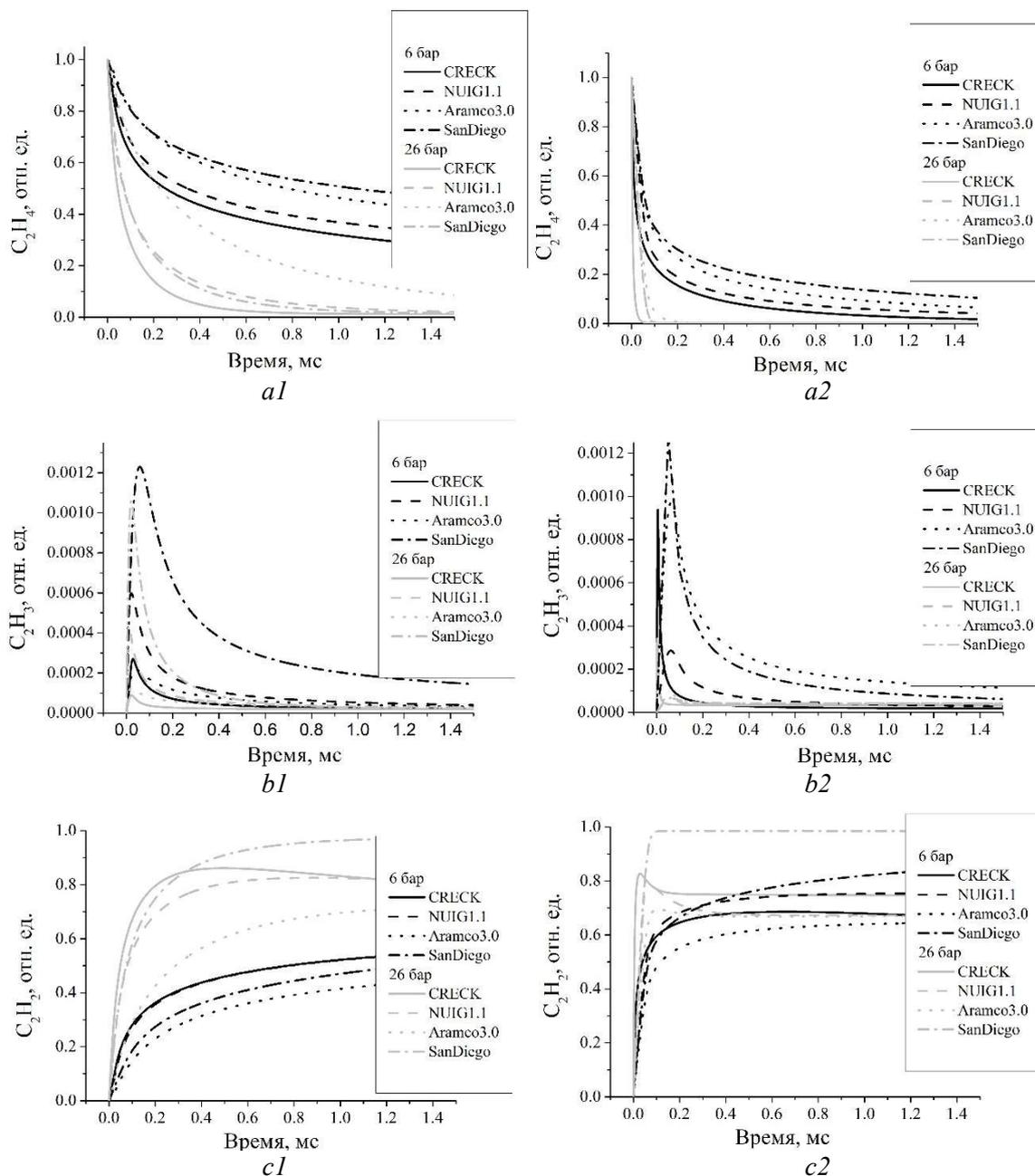


Рис. 6. Расчетные временные профили концентрации компонент (C_2H_4 – (a), C_2H_3 – (b), C_2H_2 – (c)) при пиролизе этилена при давлениях 6 бар и 26 бар и концентрации атомов углерода в смеси 3.5 моль/м³ при различных начальных температурах пиролиза T_0 : 1800 К – левая колонка, 2100 К – правая колонка; расчеты проведены по кинетическим механизмам: CRECK, NUIGMech1.1, AramcoMech3.0, SanDiego

Концентрации компонент представлены не в абсолютных значениях, а в долях относительно концентрации атомов углерода в смеси. Реакции R1 и R3 ответственны за существенное падение температуры в течение пиролиза этилена и увеличение отрицательного теплового эффекта с увеличением давления. Эту тенденцию показывают все рассмотренные в данной работе кинетические механизмы. Расчеты показывают быстрый и практически стопроцентный распад этилена в области активного сажеобразования, быстрый расход образовавшегося винильного радикала и увеличение доли ацетилена в реагирующей смеси. При этом канал распада этилена не меняется с изменением давления. Причины изменения величины падения температуры при разных давлениях требуют дополнительного исследования.

5. Заключение

Экспериментальные данные этой работы и анализ литературы показывают, что наблюдается увеличение оптической плотности (или выхода сажи) с увеличением концентрации углерода при пиролизе этилена, несмотря на нормировку на концентрацию атомов углерода в смеси.

Обнаружен сдвиг колокола выхода сажи по температуре при пиролизе этилена в зависимости от давления при одинаковой концентрации атомов углерода в смеси. При низких давлениях колокол сдвигается в область больших температур. Данные экспериментальные наблюдения объясняются кинетическими расчетами падения температуры при пиролизе этилена.

Увеличение выхода сажи с увеличением давления при постоянной концентрации углерода наблюдается только в области больших давлений $25 \div 110$ бар [9]. В диапазоне давлений $2 \div 26$ бар зависимости величины выхода сажи от давления не обнаружено.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФ № 23-19-00407.

Литература

1. Pejpichestakul W., Ranzi E., Pelucci M., Frassoldati A., Cuoci A., Parente A., Faravelli T. Examination of a soot model in premixed laminar flames at fuel-rich conditions // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2019. Vol. 37. Pp. 1013–1021. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.104
2. Tian L., Schiener M.A., Lindstedt R.P. Fully coupled sectional modelling of soot particle dynamics in a turbulent diffusion flame // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2021. Vol. 38. Pp. 1365–1373. DOI: 10.1016/j.proci.2020.06.093
3. Nmira F., Bouffard A., Liu F., Consalvi J.-L. Assessment of a PAH-based soot production model in laminar coflow methane diffusion flames doped by gasoline surrogate fuels // *Fire Safety Journal*. 2024. Vol. 150. No. 104252. DOI: 10.1016/j.firesaf.2024.104252
4. Крестинин А.В., Кислов М.Б., Раевский А.В., Колесова О.И., Стесик Л.Н. Семенов Н.Н. К вопросу о механизме образования сажевых частиц // *Кинетика и катализ*. 2000. Т. 41. № 1, С. 102–111. DOI: 10.1007/BF02756146
5. Busillo E., Vlasov P.A., Savchenko V.I., Smirnov V.N., Arutyunov V.S. Thermodynamics of the formation of polyynes and aromatic species from methane and acetylene // *Mendeleev Communication*. 2024. Vol. 34. Pp. 762–765. DOI: 10.1016/j.mencom.2024.09.044
6. Hou D., Lindberg C.S., Manuputty M.Y., You X., Kraft M. Modelling soot formation in a benchmark ethylene stagnation flame with a new detailed population balance model // *Combustion and Flame*. 2019. Vol. 203. Pp. 56–71. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.01.035
7. Xu L., Yan F., Wang Yu., Chung S.H. Chemical effects of hydrogen addition on soot formation in counterflow diffusion flames: Dependence on fuel type and oxidizer composition // *Combustion and flame*. 2020. Vol. 213. Pp. 14–25. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.11.011

8. Eremin A.V., Gurentsov E.V., Kolotushkin R.N., Mikheyeva E.Yu. Dependence of soot primary particle size on the height above a burner in target ethylene/air premixed flame // *Combustion science and technology*. 2022. Vol. 194. Pp. 2847–2863. DOI:10.1080/00102202.2021.1894138
9. Bauerle St., Karasevich Y., Slavov St., Tanke D., Thienel Th., Wagner H.G. Soot formation at elevated pressures and carbon concentrations in hydrocarbon pyrolysis // *Symposium (International) on Combustion*. 1994, Vol. 25. Pp. 627–634. DOI: 10.1016/S0082-0784(06)80694-6
10. Iuliis S.D., Chaumeix N., Idir M., Paillard C.E. Scattering/extinction measurements of soot formation in a shock tube // *Experimental Thermal and Fluid Science*. 2008. Vol. 32. Pp. 1354–1362. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2007.11.008
11. Агафонов Г.Л., Билера И.В., Власов П.А., Жильцова И.В., Колбановский Ю. А., Смирнов В. Н., Тереза А. М. Единая кинетическая модель сажеобразования при пиролизе и окислении алифатических и ароматических углеводородов в ударных волнах // *Кинетика и катализ*. 2016. Т. 57. № 5. С. 571–587.
12. Дракон А.В., Еремин А.В., Коршунова М.Р., Михеева Е.Ю. Сажеобразование при пиролизе этилена с добавками фурана и тетрагидрофурана // *Физика горения и взрыва*. 2022. Т. 58, № 4. С. 41–51. DOI: 10.15372/FGV2022040
13. Nativel D., Peucker S., Herzler J., Drakon A., Korshunova M., Mikheyeva E., Eremin A., Fikri M., Schulz C. Shock-tube study on the influence of oxygenated co-reactants on ethylene decomposition under pyrolytic conditions // *Proceedings of Combustion Institute*. 2023. Vol. 39. Issue 1. Pp. 1099–1108. DOI: 10.1016/j.proci.2022.07.209
14. Eremin A. Formation of carbon nanoparticles from the gas phase in shock wave pyrolysis processes // *Progress in Energy and Combustion Science*. 2012. Vol. 38. Pp. 1–40. DOI: 10.1016/j.pecs.2011.09.002
15. Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E. OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms // *Computer Physics Communications*. 2015. Vol. 192. Pp. 237–264. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.02.014
16. Goodwin D.G., Moffat H.K., Schoegl I., Speth R.L., Weber B.W. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes // URL: <https://www.cantera.org>, 2022. Version 2.6.0. DOI: 10.5281/zenodo.6387882
17. Baigmohammadi M., Patel V., Nagaraja S., Ramalingam A., Martinez S., Panigrahy S., Mohamed A., Somers K.P., Burke U., Heufer K.A., Pekalski A., Curran H.J. Comprehensive experimental and simulation study of the ignition delay time characteristics of binary blended methane, ethane, and ethylene over a wide range of temperature, pressure, equivalence ratio, and dilution // *Energy Fuels*. 2020. Vol. 34. Pp. 8808–8823. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.0c00960
18. Zhou C.-W., Li Y., Burke U., Banyon C., Somers K.P., Khan S., Hargis J.W., Sikes T., Petersen E.L., AlAbbad M., Farooq A., Pan Y., Zhang Y., Huang Z., Lopez J., Loparo Z., Vasu S.S., Curran H.J. An experimental and chemical kinetic modeling study of 1,3-butadiene combustion: Ignition delay time and laminar flame speed measurements // *Combustion and Flame*. 2018. Vol. 197. Pp. 423–438. DOI: 10.1016/j.combustflame.2018.08.006
19. "Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications", San Diego Mechanism web page, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego (<http://combustion.ucsd.edu>).
20. Eremin A., Gurentsov E., Mikheyeva E. Experimental study of temperature influence on carbon particle formation in shock wave pyrolysis of benzene and benzene-ethanol mixtures // *Combustion and Flame*. 2015. Vol. 162. Issue 1. Pp. 207–215. DOI: 10.1016/j.combustflame.2014.09.015

References

1. Pejpichestakul W., Ranzi E., Pelucci M., Frassoldati A., Cuoci A., Parente A., Faravelli T., Examination of a soot model in premixed laminar flames at fuel-rich conditions, *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, vol. 37, pp. 1013–1021. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.104

2. Tian L., Schiener M. A., Lindstedt R. P., Fully coupled sectional modelling of soot particle dynamics in a turbulent diffusion flame, *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, vol. 38, pp. 1365–1373. DOI: 10.1016/j.proci.2020.06.093
3. Nmira F., Bouffard A., Liu F., Consalvi J.-L., Assessment of a PAH-based soot production model in laminar coflow methane diffusion flames doped by gasoline surrogate fuels, *Fire Safety Journal*, 2024, vol. 150, no. 104252. DOI: 10.1016/j.firesaf.2024.104252
4. Krestinin A. V., Kislov M. B., Raevskii A. V., Kolesova O. I., Stesik L. N., On the mechanism of soot particle formation, *Kinetics and Catalysis*, 2000, vol. 41, no. 1, pp. 90–98. DOI: 10.1007/BF02756146
5. Busillo E., Vlasov P. A., Savchenko V. I., Smirnov V. N., Arutyunov V. S., Thermodynamics of the formation of polyynes and aromatic species from methane and acetylene, *Mendeleev Communication*, 2024, vol. 34, pp. 762–765. DOI: 10.1016/j.mencom.2024.09.044
6. Hou D., Lindberg C. S., Manuputty M. Y., You X., Kraft M., Modelling soot formation in a benchmark ethylene stagnation flame with a new detailed population balance model, *Combustion and Flame*, 2019, vol. 203, pp. 56–71. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.01.035
7. Xu L., Yan F., Wang Yu., Chung S. H., Chemical effects of hydrogen addition on soot formation in counterflow diffusion flames: Dependence on fuel type and oxidizer composition, *Combustion and Flame*, 2020, vol. 213, pp. 14–25. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.11.011
8. Eremin A. V., Gurentsov E. V., Kolotushkin R. N., Mikheyeva E. Yu., Dependence of soot primary particle size on the height above a burner in target ethylene/air premixed flame, *Combustion science and technology*, 2022, vol. 194, pp. 2847–2863. DOI: 10.1080/00102202.2021.1894138
9. Bauerle St., Karasevich Y., Slavov St., Tanke D., Thienel Th., Wagner H.G., Soot formation at elevated pressures and carbon concentrations in hydrocarbon pyrolysis, *Symposium (International) on Combustion*, 1994, vol. 25, pp. 627–634. DOI: 10.1016/S0082-0784(06)80694-6
10. Iuliis S.D., Chaumeix N., Idir M., Paillard C.E., Scattering/extinction measurements of soot formation in a shock tube, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2008, vol. 32, pp. 1354–1362. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2007.11.008
11. Agafonov G. L., Biler I. V., Vlasov P. A., Zhil'tsova I. V., Kolbanovskii Yu. A., Smirnov V. N., Tereza A. M., Unified kinetic model of soot formation in the pyrolysis and oxidation of aliphatic and aromatic hydrocarbons in shock waves, *Kinetics and Catalysis*, 2016, vol. 57, pp. 557–572. DOI: 10.1134/S0023158416050013
12. Drakon A. V., Eremin A. V., Korshunova M. R., Mikheeva E. Yu., Soot Formation in Ethylene Pyrolysis with Furan and Tetrahydrofuran Additives, *Combustion Explosion and Shock Waves*, 2022, vol. 58, pp. 430–439. DOI: 10.1134/S0010508222040050
13. Nativel D., Peuker S., Herzler J., Drakon A., Korshunova M., Mikheyeva E., Eremin A., Fikri M., Schulz C, Shock-tube study on the influence of oxygenated co-reactants on ethylene decomposition under pyrolytic conditions, *Proceedings of Combustion Institute*, 2023, vol. 39, issue 1, pp. 1099–1108. DOI: 10.1016/j.proci.2022.07.209
14. Eremin A., Formation of carbon nanoparticles from the gas phase in shock wave pyrolysis processes, *Progress in Energy and Combustion Science*, 2012, vol. 38, pp. 1–40. DOI: 10.1016/j.peccs.2011.09.002
15. Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E., OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms, *Computer Physics Communications*, 2015, vol. 192, pp. 237–264. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.02.014
16. Goodwin D. G., Moffat H. K., Schoegl I., Speth R. L., Weber B. W., Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes, URL: <https://www.cantera.org>, 2022. Version 2.6.0. DOI: 10.5281/zenodo.6387882
17. Baigmohammadi M., Patel V., Nagaraja S., Ramalingam A., Martinez S., Panigrahy S., Mohamed A., Somers K.P., Burke U., Heufer K.A., Pekalski A., Curran H.J., Comprehensive experimental and simulation study of the ignition delay time characteristics of binary blended methane, ethane, and ethylene over a wide range of temperature, pressure, equivalence ratio, and dilution, *Energy Fuels*, 2020, vol. 34, pp. 8808–8823. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.0c00960

18. Zhou C.-W., Li Y., Burke U., Banyon C., Somers K. P., Khan S., Hargis J.W., Sikes T., Petersen E. L., AlAbbad M., Farooq A., Pan Y., Zhang Y., Huang Z., Lopez J., Loparo Z., Vasu S. S., Curran H. J., An experimental and chemical kinetic modeling study of 1,3-butadiene combustion: Ignition delay time and laminar flame speed measurements, *Combustion and Flame*, 2018, vol. 197, pp. 423–438. DOI: 10.1016/j.combustflame.2018.08.006
19. "Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications", San Diego Mechanism web page, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego (<http://combustion.ucsd.edu>).
20. Eremin A., Gurentsov E., Mikheyeva E., Experimental study of temperature influence on carbon particle formation in shock wave pyrolysis of benzene and benzene-ethanol mixtures, *Combustion and Flame*, 2015, vol. 162, issue 1, pp. 207–215. DOI: 10.1016/j.combustflame.2014.09.015

Статья поступила в редакцию 25 ноября 2024 г.