

CFD-МОДЕЛИРОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ C₆H₅ В ТРУБКЕ ИЗ SiC

Кузнецов О. В.¹, Медведков Я.А.^{1,2}, Толстов Г. И.^{1,2}, Загидуллин М.В.^{1,2},
Аязов В. Н.^{1,2}, Мебель А.М.^{1,3}

¹Самарский университет, г. Самара,

²Самарский филиал ФИАН, г. Самара

³Международный университет Флориды, Майами, США
electron97@rambler.ru

Ключевые слова: химия горения, CFD-моделирование, химическая кинетика, физическая химия, окисление.

Экспериментальное определение констант реакций является сложной и актуальной проблемой в современной химической физике и кинетике горения. Для этих задач в последнее время часто используются высокотемпературные микрореакторы (ВТМР). Основным элементом ВТМР является омически нагреваемая трубка из SiC, Al₂O₃ и TiO₂ или другого термостойкого материала. Однако, у этого подхода есть две основные проблемы, затрудняющие точное определение констант: ускорение газа в реакторе приводит к значительному снижению давления и большой скорости газа на выходе из реактора, и неравномерное распределение температуры по длине реактора, приводящее к разным скоростям химических реакций в разных областях реактора.

Для решения этих проблем на первом этапе необходимо построение физической модели микрореактора и нахождение распределений давления и температуры. Для этого применяется вычислительная гидродинамика (CFD моделирование) – численное решение уравнений непрерывности для различных процессов в реакторе. Этот метод позволяет достаточно точно определять распределение температуры, давления и концентрации веществ. Для построения модели был выбран ВТМР, использованный в эксперименте в статье [1].

По результатам моделирования было найдено распределение температуры и давления газа в ВТМР. Показано, что замена SiC на Al₂O₃ или TiO₂ существенно влияет на температурный профиль реактора. Показано, что оптимальным с точки зрения равномерности распределения температуры является TiO₂.

Список литературы

1. Parker D.S.N. и др. Toward the Oxidation of the Phenyl Radical and Prevention of PAH Formation in Combustion Systems // J. Phys. Chem. A. 2015. Т. 119. № 28. С. 7145–7154.

Сведения об авторах

Кузнецов Олег Владимирович, студент Самарского университета. Область научных интересов: оптика, спектроскопия, лазерная физика, физическая химия.

Медведков Яков Андреевич, к.х.н., высоко квалифицированный научный сотрудник СФ ФИАН. Область научных интересов: оптика, спектроскопия, лазерная физика, физическая химия.

Толстов Георгий Игоревич, аспирант Самарского университета, высоко квалифицированный младший научный сотрудник СФ ФИАН. Область научных интересов: оптика, спектроскопия, лазерная физика, физическая химия.

Загидуллин Марсель Вакифович. д.ф.-м.н., главный научный сотрудник ЛФХК Самарского филиала ФИАН. Область научных интересов: оптика, спектроскопия, лазерная физика, физическая химия.

Аязов Валерий Николаевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры физики Самарского университета, директор Самарского филиала ФИАН. Область научных интересов: оптика, спектроскопия, лазерная физика, физическая химия.

Мебель Александр Моисеевич, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник НИЛ-101 «Физика и химия горения» Самарского университета. Область научных интересов: физическая химия, органическая химия, спектроскопия, лазерная физика.

CFD-MODELING OF C₆H₅ OXIDATION IN SiC TUBE

Kuznetsov O. V.¹, Medvedkov I.A.^{1,2}, Tolstov G. I.^{1,2}, Zagidullin M.V.^{1,2}, Azyazov V. N.^{1,2},
Mebel A.M.^{1,3}

¹Samara National Research University, Samara, Russia, electron97@rambler.ru

²Lebedev Physical Institute, Samara, Samara, Russia

³Florida International University, Miami, Florida, 33199, USA

Keywords: combustion chemistry, CFD-modeling, chemical kinetics, physical chemistry, oxidation.

This paper presents results of the computational fluid dynamics modeling of C₆H₅ oxidation in SiC tube. This approach allowed us to find the temperature and pressure distributions inside the tube. It was shown that changing the tube material significantly influences the temperature distribution.