

## КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОКИСЛЕНИЯ И САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТРИЭТИЛАЛЮМИНИЯ В ВОЗДУХЕ\*

Н. М. Кузнецов<sup>1</sup>, С. М. Фролов<sup>2</sup>, П. А. Стороженко<sup>3</sup>, И. О. Шамшин<sup>4</sup>

**Аннотация:** Предложена модельная схема гетерогенного взаимодействия кислорода воздуха с микрокаплями горючего — триэтилалюминия  $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ . Предполагается, что основной реакцией, ответственной за самовоспламенение стехиометрической смеси горючего с воздухом, является реакция внедрения молекул кислорода в молекулы горючего с последующим мономолекулярным распадом продукта внедрения и с выходом легких углеводородных радикалов в газовую фазу. Определена скорость выхода в зависимости от размера микрокапель и энергии активации константы скорости реакции внедрения. В газовой фазе радикалы взаимодействуют с кислородом, порождая другие последовательные и параллельные реакции, такие же как при газофазной кинетике окисления, воспламенения и горения легких алканов (метана, этана и бутана) и их производных. Кинетические схемы, соответствующие уравнения химической кинетики, алгоритмы и программы, описывающие подобные газофазные процессы, существуют, и их предполагается использовать в качестве подпрограмм применительно к вариантам численного решения задачи о кинетике самовоспламенения.

**Ключевые слова:** триэтилалюминий; реакция внедрения; константа скорости; энергия активации; микрокапля; задержка воспламенения (период индукции); прямая и обратная задачи

**DOI:** 10.30826/CE19120310

### Литература

1. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А. Расчет стандартной энтальпии образования и теплоты полного сгорания триэтилалюминия в водяном паре и в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 2. С. 10–13.
2. Справочник «Энергии разрыва химических связей, потенциалы ионизации и средство к электрону» / Под ред. акад. В. Н. Кондратьева. — М.: Наука, 1974. 352 с.
3. Dean J. A. Lange's handbook of chemistry. — 15th ed. — McGraw-Hill, Inc., 1990. 1292 p.
4. Краткий справочник физико-химических величин / Под ред. К. П. Мищенко, А. А. Равделя. — 5-е изд. — Л.: Изд-во Химия, 1967. 184 с.
5. Робинсон П., Холбрук К. Мономолекулярные реакции / Пер. с англ. — М.: Мир, 1975. 380 с. (Robinson P. J., Holbrook K. A. Unimolecular reactions. — London: Wiley-Interscience, 1972. 388 p.)
6. Кузнецов Н. М. Кинетика мономолекулярных реакций. — М.: Наука, 1982. 221 с.
7. Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е., Резников А. И., Уманский С. Я. Термические бимолекулярные реакции в газах. — М.: Наука, 1976. 191 с.
8. Семенов Н. Н. Избранные труды. Т. 3: О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. — М.: Наука, 2005. 499 с.

Поступила в редакцию 27.06.19

\*Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 0082-2016-0011 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», номер государственной регистрации АААА-А17-117040610346-5, и субсидии, выделенной ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 14) по теме № 0065-2019-0005 «Математическое моделирование динамических процессов в деформируемых и реагирующих средах с использованием многопроцессорных вычислительных систем» (номер государственной регистрации АААА-А19-119011590092-6), а также частично при поддержке РФФИ (проект 16-29-01065офи-м).

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, N-M-Kuznetsov@yandex.ru

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

<sup>3</sup>ГНЦ РФ АО «Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений», bigpastor@mail.ru

<sup>4</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, igor\_shamshin@mail.ru