

## **От редактора**

Данный сборник включает 36 оригинальных статей, обобщающих результаты работ, проводимых сотрудниками ЦИАМ за последние 5 лет по различным аспектам кинетики физико-химических процессов в реагирующих потоках и в плазме, а также по современным проблемам физики горения и взрыва. В ЦИАМ эти работы сконцентрированы в отделении 600 и в Научно-образовательном Центре «Кинетика физико-химических процессов и горение», который был создан в 2009 г. на базе отделения 600. Задачами отделения 600 являются проведение фундаментальных и прикладных исследований по различным разделам физики неравновесных процессов и физико-химической кинетики с целью создания опережающего научно-технического задела для разработки нового поколения двигателей для аэрокосмических систем различного назначения и наземных энергетических установок с пониженным уровнем эмиссии загрязняющих атмосферу соединений.

Книга состоит из 7 разделов:

**Раздел 1** Кинетические модели горения углеводородных и синтетических топлив в воздухе.

**Раздел 2** Термически неравновесные процессы за ударными волнами и при горении.

**Раздел 3** Неравновесные процессы в кластерной и аэрозольной плазме, образующейся в камерах сгорания и выхлопных струях реактивных двигателей.

**Раздел 4** Интенсификация горения газовых смесей при возбуждении реагирующих молекул электрическим разрядом.

**Раздел 5** Горение, инициированное лазерным излучением.

**Раздел 6** Математическое моделирование процессов горения в камерах сгорания перспективных реактивных двигателей.

**Раздел 7** Образование экологически опасных компонентов в камерах сгорания и в струях реактивных двигателей.

В разделе 1 рассмотрены особенности построения детальных реакционных механизмов процессов окисления и пиролиза органических (предельные и непредельные углеводороды, авиационные керосины), неорганических (водород, синтез-газ) и металлизированных топлив в воздухе.

В первой статье *Старик А. М., Титова Н. С. и Шарипов А. С.* представили реакционный механизм, предназначенный для описания воспламенения и горения смесей водород/воздух и синтез-газ/воздух. Для верификации кинетической модели использовался обширный набор экспериментальных данных по временам задержки воспламенения, скорости распространения ламинарного пламени и временной эволюции концентраций основных компонентов, полученных в ударных трубах и в проточном реакторе. Показано, что разработанная авторами кинетическая модель позволяет получить заметно лучшее, чем современные реакционные механизмы, разработанные другими авторами, соответствие измеренным значениям времени задержки воспламенения.

*Кулецов П. С., Старик А. М. и Титова Н. С.* разработали детальную кинетическую модель воспламенения и горения метана и пропана, а также различных смесей на их основе в кислороде (воздухе). Модель включает как высокотемпературный, так и низкотемпературный механизмы окисления и содержит 599 обратимых реакций с участием 92 компонентов. Преимущества модели данной работы особенно заметны при описании низкотемпературного окисления пропана в проточном реакторе, где созданные к настоящему времени реакционные механизмы даже качественно не описывают экспериментальные данные. Еще одним достоинством разработанной кинетической модели является ее способность правильно предсказывать такие интегральные характеристики, как время задержки воспламенения и скорость распространения ламинарного пламени для смесей углеводородов  $\text{CH}_4\text{--C}_2\text{H}_6\text{--C}_3\text{H}_8$  с добавкой водорода.

В работе *Титовой Н. С., Торохова С. А. и Старика А. М.* представлена укрупненная кинетическая модель для описания окисления и пиролиза *n*-декана и *n*-додекана, включающая как высоко-, так и низкотемпературный механизмы развития цепного процесса. Модель позволяет с более высокой точностью, чем существующие в настоя-

щее время модели, описать экспериментальные данные по задержкам воспламенения в смесях  $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}/\text{O}_2$ (воздух) и  $n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$ /воздух как при высоких ( $T_0 = 1000\text{--}1800 \text{ K}$ ), так и при низких ( $T_0 = 650\text{--}1000 \text{ K}$ ) температурах в широком диапазоне начальных давлений ( $P_0 = 1,2\text{--}80 \text{ atm}$ ) и эквивалентного отношения топливо/окислитель ( $\phi = 0,5\text{--}3$ ). На основе этой модели проведен анализ особенностей низкотемпературного воспламенения  $n$ -декана в воздухе. Подробно рассмотрены механизмы, ответственные за возникновение «холодно-пламенных явлений» при окислении тяжелых углеводородов.

В следующей статье *Титова Н. С., Торохов С. А. и Старик А. М.* представили детальную кинетическую модель для описания воспламенения и горения суррогатных смесей, представляющих авиационные керосины. Кинетическая модель для такой смеси объединяет реакционные механизмы для окисления  $n$ -декана и бензола. Эта модель позволяет описывать с удовлетворительной точностью экспериментальные данные по времени задержки воспламенения топлива Jet-A в достаточно широком диапазоне начальных температур  $T_0 = 715\text{--}1750 \text{ K}$  и коэффициента избытка топлива  $\phi = 0,5\text{--}2$ . Созданный реакционный механизм существенно лучше описывает экспериментальные данные, чем механизмы других авторов.

В статье *Старика А. М., Титовой Н. С. и Шарипова А. С.* проведен теоретический анализ кинетических процессов при воспламенении комбинированного топлива, состоящего из метана и наночастиц Al. На основе *ab initio* расчетов определены возможные каналы химических реакций с участием Al-содержащих компонентов и углеводородных радикалов и рассчитаны их константы скорости. Построена кинетическая модель воспламенения и горения такого комбинированного топлива. Показано, что введение небольшого ( $\sim 5\%$  по массе) количества Al в метанокислородную смесь позволяет значительно сократить время задержки воспламенения, а также уменьшить температуру воспламенения.

В следующей статье *Старик А. М., Титова Н. С. и Шарипов А. С.* провели сравнительный анализ предсказательной способности двух подходов к оценке констант скорости реакций с участием электронно-возбужденных молекул кислорода. Первый подход предполагает детальное *ab initio* исследование возбужденных поверхностей потен-

циальной энергии. Второй подход представляет собой модификацию метода вибронных термов и позволяет легко оценивать активационные барьеры реакций с участием электронно-возбужденных молекул без привлечения квантово-химических расчетов.

В работе *Старика А. М. и Шарипова А. С.* рассмотрены возможности применения расчетных методов квантовой химии к анализу процессов окисления углеводородов синглетным кислородом. Проведен *ab initio* расчет поверхностей потенциальной энергии реакции молекулы CH<sub>4</sub> с молекулярным кислородом в состояниях O<sub>2</sub>(X<sup>3</sup>Σ<sub>g</sub><sup>-</sup>), O<sub>2</sub>(a<sup>1</sup>Δ<sub>g</sub>) и O<sub>2</sub>(b<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup>). Для соответствующих процессов на основе теории активированного комплекса получены аппроксимации констант скорости.

В разделе 2 анализируются особенности описания термически неравновесных процессов в различных реагирующих молекулярных системах за ударными волнами.

*Луховицкий Б. И. и Старик А. М.* рассмотрели взаимное влияние электронно-колебательного обмена и химических процессов в приближении уровневой и модовой кинетики на динамику установления термодинамического равновесия в потоке молекулярного кислорода за фронтом ударных волн различной интенсивности. Показано, что для правильного описания поведения концентраций компонентов смеси необходимо использовать уровневую модель колебательной кинетики как для молекул O<sub>2</sub> в основном электронном состоянии, так и в электронных состояниях O<sub>2</sub>(a<sup>1</sup>Δ<sub>g</sub>) и O<sub>2</sub>(b<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup>).

В статье *Арсентьева И. В., Луховицкого Б. И. и Старика А. М.* построена модель, позволяющая рассчитывать константы скоростей реакций разных типов и изменение колебательной энергии компонентов в этих реакциях в термически неравновесных условиях. Модель основана на простых физических принципах, не содержит полуэмпирических параметров и применима, в отличие от других моделей, в случаях, когда реагенты и продукты реакций содержат несколько колебательных мод. Проводится сравнение расчетов фактора неравновесности и энергии, выделяющейся в колебательные степени свободы продуктов химической реакции, по предложенной модели и по другим известным моделям.

*Арсентьев И. В., Старик А. М. и Титова Н. С.* на основе расширенной термически неравновесной кинетической модели, включающей реакции с электронно-возбужденными атомами и молекулами и учитывающей колебательно-электронно-химическое взаимодействие, провели детальный анализ образования нейтральных и заряженных частиц в молекулярной системе  $\text{N}_2\text{--O}_2\text{--Ar}$  за сильными ударными волнами. Показано, что модель, не учитывающая эти процессы, значительно завышает концентрации и заряженных, и нейтральных частиц и не позволяет правильно предсказать длину релаксационной зоны.

В работе *Арсентьева И. В., Лосева С. А., Луховицкого Б. И. и Старика А. М.* представлена термически неравновесная кинетическая модель, описывающая плазмохимические процессы в смеси  $\text{CO}_2\text{--N}_2$  за сильными ударными волнами, и рассмотрено взаимное влияние химических процессов, неравновесного возбуждения молекулярных колебаний и электронных состояний атомов и молекул, а также их взаимодействие с электронным газом. Проведен анализ процессов, происходящих в релаксационной зоне за ударной волной в смеси  $\text{CO}_2/\text{N}_2 = 97/3$ , моделирующей атмосферу Марса.

*Луховицкий Б. И., Титова Н. С., Старик А. М. и Шарипов А. С.* рассмотрели влияние неравновесного возбуждения молекулярных колебаний реагирующих молекул на воспламенение водородно-кислородной смеси, метановоздушной смеси и смеси синтез-газа с воздухом за фронтом наклонной ударной волны и показали, что использование для анализа процесса воспламенения термически равновесных моделей химической кинетики может привести к значительным погрешностям при определении длины зоны индукции и конечного давления в продуктах сгорания.

**Раздел 3** посвящен анализу механизмов формирования ионов, заряженных кластеров и наночастиц в кластерной и аэрозольной плазме, которая образуется при горении углеводородных и металлизированных топлив, в струях реактивных двигателей и в атмосфере.

В работе *Старика А. М., Савельева А. М., Титовой Н. С. и Рейн О. Э.* исследуются процессы формирования заряженных газовых компонентов, кластеров и сажевых частиц в углеводородно-воздушных пламенах. Показано, что формирование полидисперсного ансам-

бля положительно и отрицательно заряженных частиц происходит из-за прилипания ионов к первичным и вторично сформированным частицам, а также коагуляции заряженных и нейтральных частиц.

*Савельев А. М. и Стариk А. М.* представили краткий анализ классических и кинетических моделей ионно-индуцированной нуклеации. Для бинарной  $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$  системы на основе последовательного кинетического подхода проведены расчеты нестационарной кластеризации при наличии в системе ионов  $\text{HSO}_4^-$ . Показано, что только на достаточно больших временах в рассматриваемой системе формируется стационарное распределение мелких кластеров с числом молекул  $\text{H}_2\text{SO}_4$   $s = 1\text{--}6$ , и только в этом случае справедливо использование классической теории ионно-индуцированной нуклеации.

В другой работе *Савельева А. М. и Старика А. М.* рассматривается влияние различных типов взаимодействия между частицами нанометрового размера: Ван-дер-Ваальсовского, кулоновского и поляризационного — на скорость их коагуляции в зависимости от величины и знака заряда на частицах, а также влияния Ван-дер-Ваальсовских сил на скорость прилипания молекул к нейтральным кластерам в аэродисперсных плазменных системах. Показано, что действие Ван-дер-Ваальсовских и поляризационных сил существенно увеличивает скорость коагуляции нейтральной и заряженной частиц, а Ван-дер-Ваальсовское взаимодействие между нейтральным кластером и молекулой в 2–2,5 раза усиливает скорость осаждения молекул.

В следующей статье *Савельев А. М. и Стариk А. М.* рассмотрели особенности образования пылевой плазмы за фронтом ударной волны, распространяющейся в мезосфере Земли. Показано, что наличие в мезосфере частиц двух типов (проводящих  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  и диэлектрических  $\text{SiO}_2$ ) приводит к образованию за фронтом ударной волны как положительно, так и отрицательно заряженных частиц. При не очень высоких температурах за фронтом их зарядка происходит только в результате термоэлектронной эмиссии, а при более высоких температурах значительную роль играют хемо-ионизационные реакции, в результате которых образуется большое количество ионов и электронов.

*Стариk А. М., Титова Н. С., Секундов А. Н. и Щепин С. А.* численно исследовали особенности формирования ионов и электронов при

горении различных углеводородных топлив в пламени и в камере сгорания авиационного двигателя. Получено качественное соответствие рассчитанных значений концентраций положительных и отрицательных ионов экспериментальным данным. Показано, что в камере сгорания реактивного двигателя, работающей в диффузионном режиме, наибольшая концентрация в богатой зоне камеры сгорания достигается для ионов  $C_2H_3O^+$  и электронов и составляет  $10^{11}\text{--}10^{12} \text{ см}^{-3}$ , а в выходном сечении доминирующими являются ионы  $NO^+$ ,  $NO_3^-$ ,  $C_3H_7O^+$ ,  $SO_3^-$  и  $HSO_4^-$ , но их концентрация не превышает  $2\cdot10^8 \text{ см}^{-3}$ .

В последней статье этого раздела *Савельев А. М. и Старик А. М.* на основе траекторных расчетов проанализировали особенности взаимодействия дипольных двухатомных молекул с заряженной частицей нанометрового размера. Установлено, что традиционный подход к описанию прилипания полярной молекулы к заряженной частице, основанный на использовании осредненного потенциала взаимодействия, полученного в предположении равновесного распределения ориентации дипольного момента молекулы в поле точечного заряда и центрально симметричного характера взаимодействия полярной молекулы и частицы, не позволяет правильно выявить важные особенности такого взаимодействия.

В разделе 4 рассматриваются фундаментальные и прикладные аспекты проблемы интенсификации цепных реакций в реагирующих смесях при помощи электрического разряда.

*Плевако Ф. В., Жданок С. А., Чернух А. П., Наумов В. В. и Старик А. М.* исследовали потенциальные возможности комбинированного скрещенного разряда, состоящего из высоковольтного импульсного барьерного разряда и поддерживающего разряда постоянного тока, генерировать электронно-возбужденные молекулы синглетного кислорода  $O_2(a^1\Delta_g)$  и  $O_2(b^1\Sigma_g^+)$  в бинарной смеси  $O_2/\text{He}$  при непрерывном режиме работы при субатмосферном давлении. Установлено, что выход синглетного кислорода увеличивается с увеличением мощности разряда постоянного тока и меняется в зависимости от процентного содержания кислорода в смеси  $O_2/\text{He}$  в диапазоне 1%–5%.

*Смирнов В. В., Старик А. М., Стельмах О. М., Титова Н. С. и Чернух А. П.* представили результаты расчетно-экспериментального

исследования влияния молекул кислорода, возбужденных в синглетное электронное состояние  $a^1\Delta_g$  в электрическом разряде, на сокращение длины зоны индукции при горении смеси  $\text{H}_2\text{--O}_2$  в дозвуковом потоке при низком давлении. Показано, что даже при небольшой концентрации молекул  $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$  в молекулярном кислороде ( $\sim 3,9\%$ ) воспламенение водородно-кислородной смеси становится возможным при температуре газа ниже порога самовоспламенения и при этом также удается втрое сократить длину задержки воспламенения по сравнению со случаем отсутствия молекул  $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$  в смеси.

*Старик А. М., Луховицкий Б. И., Титова Н. С. и Чернухो А. П.* на основе численного моделирования провели анализ механизмов, ответственных за интенсификацию воспламенения смесей  $\text{H}_2\text{--O}_2$  и  $\text{CH}_4\text{--O}_2$  при активации молекулярного кислорода электрическими разрядами с различными значениями приведенной напряженности электрического поля. Расчеты показали, что наличие колебательно- и электронно-воздужденных молекул  $\text{O}_2$ , а также атомов О в кислородной плазме позволяет интенсифицировать цепной механизм воспламенения даже при небольших значениях вложенной в газ энергии электрического разряда, а величина задержки воспламенения существенно зависит от типа используемого разряда.

В статье *Старика А. М., Козлова В. Е. и Титовой Н. С.* анализируется возможность увеличения скорости распространения ламинарного пламени в смесях  $\text{H}_2$ -воздух и  $\text{CH}_4$ -воздух при возбуждении молекул  $\text{O}_2$  в синглетное состояние  $a^1\Delta_g$ . Показано, что наличие в исходной смеси даже 10% молекул  $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$  по отношению к обычному кислороду приводит к заметному (до 70%) ускорению горения. Изменяя концентрацию  $\text{O}_2(a^1\Delta_g)$  в исходной смеси, т. е. изменяя степень возбуждения, можно сохранять скорость распространения пламени постоянной при изменяющихся параметрах смеси (давлении и температуре).

В работе *Старика А. М., Шарипова А. С. и Титовой Н. С.* проведено исследование механизмов интенсификации горения смеси синтез-газ/воздух в сверхзвуковом потоке за наклонной ударной волной при предварительном возбуждении колебаний молекул реагентов. Данный эффект обусловлен интенсификацией цепных реакций, главным образом, из-за увеличения констант скорости реакций с участием ко-

лебательно-возбужденных молекул, и появлением новых каналов развития цепного механизма. Возбуждение колебаний реагирующих молекул  $H_2$ ,  $CO$  и  $N_2$  намного более эффективно в смысле сокращения длины зоны индукции, чем простой нагрев смеси при одинаковом количестве подведенной энергии. Инициирование горения при низкой температуре за фронтом ударной волны в случае возбуждения колебаний молекул  $H_2$ ,  $N_2$  и  $CO$  дает возможность более эффективного преобразования химической энергии реагентов в тепловую энергию по сравнению с обычным методом инициирования горения путем нагрева смеси.

**Раздел 5** посвящен комплексному анализу механизмов инициирования горения лазерным излучением.

В работе *Старика А. М. и Луховицкого Б. И.* проводится сравнительный анализ различных методов лазерно-индуцированного инициирования горения, включая метод локального нагрева среды лазерным излучением, фотохимический метод, в основе которого лежит диссоциация исходных компонентов, метода лазерной искры и метода, основанного на возбуждении внутренних степеней свободы реагирующих молекул лазерным излучением. Дано сравнение эффективности возбуждения колебательных, электронных и электронно-колебательных состояний некоторых молекул и влияния данного возбуждения на скорости цепных реакций с их участием в водородно- и углеводородно-воздушных смесях.

*Луховицкий Б. И., Старик А. М. и Титова Н. С.* проанализировали возможность интенсификации воспламенения и горения смесей  $H_2(CH_4, C_2H_2)-O_2$ (воздух) с добавками  $H_2O$  либо  $O_3$  при возбуждении асимметричных колебаний молекул воды или озона резонансным лазерным излучением. Показано, что возбуждение колебаний молекул  $H_2O$  или  $O_3$  при их добавлении как в относительно легко воспламеняемые водородно-воздушные смеси, так и в тяжело воспламеняемые углеводородно-воздушные смеси позволяет существенно снизить температуру воспламенения и время индукции в достаточно широком диапазоне начальных параметров газа.

*Старик А. М. и Шарипов А. С.* провели анализ влияния возбуждения молекулярных колебаний  $CO$  резонансным лазерным излучением

с длиной волны 4,677 мкм на кинетику инициирования горения синтез-газа в воздухе. Показано, что возбуждение колебаний молекул CO лазерным излучением приводит к ускорению цепных реакций в смеси синтез-газ/воздух и, как следствие, к значительному (в 10–100 раз) сокращению времени индукции, а также к значительному снижению температуры воспламенения даже при небольшой величине энергии излучения, подведенной к газу ( $E_s = 0,4$  эВ/(мол CO)).

В работе *Кулешова П. С., Старика А. М. и Титовой Н. С.* рассмотрены кинетические механизмы, ответственные за интенсификацию цепных реакций в гомогенных водородно-воздушных и метано-воздушных смесях при фотодиссоциации молекул O<sub>2</sub> лазерным излучением с длиной волны  $\lambda_I = 193,3$  нм и при возбуждении в электронное состояние  $b^1\Sigma_g^+$  излучением с  $\lambda_I = 762,346$  нм. На основе численного моделирования показано, что для метановоздушных смесей лазерно-индущированное возбуждение молекул O<sub>2</sub> в состояние  $b^1\Sigma_g^+$  более эффективно с точки зрения сокращения времени индукции и температуры воспламенения, чем диссоциация молекул O<sub>2</sub> лазерным излучением. Для водородно-воздушных смесей, напротив, метод лазерно-индущированного воспламенения, основанный на диссоциации молекул O<sub>2</sub>, более энергетически выгоден, чем метод, в основе которого лежит возбуждение кислорода в синглетное состояние  $b^1\Sigma_g^+$ .

В статье *Безгина Л. В., Копченова В. И., Кулешова П. С., Старика А. М. и Титовой Н. С.* численно исследуется возможность интенсификации воспламенения водорода в сверхзвуковом слое смешения с воздушным потоком при лазерно-индущированном возбуждении молекул O<sub>2</sub> в электронное состояние  $b^1\Sigma_g^+$  и при фотодиссоциации молекул O<sub>2</sub> лазерным излучением в случае достаточно низких температур воздуха (800–900 К) при давлении  $P_0 = 0,1$ –1 бар. Показано, что для значительного (в десятки и даже в сотни раз) сокращения длины задержки воспламенения достаточно облучения потока воздуха в слое толщиной 1–2 см на границе с водородной струей излучением с удельной энергией  $\sim 3 \cdot 10^{-2}$  Дж/см<sup>3</sup>. Эквивалентный нагрев слоя воздуха оказывается существенно менее эффективным, чем рассмотренные методы лазерного воздействия, и не позволяет решить задачу снижения длины задержки воспламенения до приемлемого уровня.

**Раздел 6** посвящен вопросам математического моделирования процессов различных режимов горения в условиях, близким к условиям в камерах сгорания реактивных двигателей для высокоскоростных летательных аппаратов, когда в потоке возникают слои смешения и различного рода газодинамические возмущения.

В работе *Савельева А. М., Брайнина Б. И. и Старика А. М.* рассматривается возможность повышения энергетических характеристик углеводородных топлив путем введения в них наночастиц легких металлов и металлоидов. На основе термодинамического подхода показана возможность увеличения экономичности турбореактивного двигателя за счет добавок к жидкому керосину В, Al, Be и BeH<sub>2</sub>. Например, при 20% содержании бора в двухкомпонентном горючем можно уменьшить потребный расход горючего в турбореактивном двигателе на 5%. Установлено, что введение в жидкое углеводородное топливо В, Al и Be позволяет заметно увеличить массу полезного груза при выводе спутников на геостационарную орбиту и повысить удельный импульс ракетного двигателя.

В статье *Безгина Л. В., Копченова В. И., Старика А. М. и Титовой Н. С.* рассматриваются особенности термодеструкции газообразного пропана при его нагреве и анализируется возможное влияние состава продуктов термодеструкции на процесс воспламенения в спутном потоке нагретого воздуха. Путем численного моделирования показано, что положительное влияние изменения состава топлива в процессе термодеструкции на воспламенение имеет место лишь для определенного состава продуктов разложения C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>. Положительный эффект определяется в значительной степени балансом концентраций водорода, стимулирующего развитие цепного процесса, и метана как наиболее трудно воспламеняемого компонента в образовавшейся при пиролизе пропана смеси.

В другой статье тех же авторов (*Безгин Л. В., Копченов В. И., Старик А. М. и Н. С. Титова*) анализируется возможность интенсификации формирования детонационного скачка при обтекании плоского клина сверхзвуковым потоком водородно-кислородной смеси. Показано, что возбуждение молекул O<sub>2</sub> в электронное состояние b<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> резонансным лазерным излучением с длиной волны 762 нм перед носиком клина позволяет осуществить детонационное горение на рас-

стоянии  $\sim 1$  м от носика клина при низкой температуре смеси (500–600 К). При этом достаточно проводить облучение газа в узкой приосевой области потока с поперечным размером 0,5–1 см. При отсутствии облучения для таких параметров потока не удается сформировать детонационную волну на расстояниях, меньших 5,5 м от носика клина.

В следующей статье *Безгин Л. В., Копченов В. И., Старицк А. М. и Н. С. Титова* провели численное исследование влияния термической неравновесности на формирование детонационной волны при обтекании клина сверхзвуковым потоком смеси  $H_2-O_2$ . Оказалось, что замедленное возбуждение молекулярных колебаний исходных реагентов за фронтом наклонной ударной волны, реализующейся при обтекании клина сверхзвуковым потоком газа, приводит к заметному увеличению длины зоны индукции и переходной зоны по сравнению с соответствующими величинами, полученными в рамках термически равновесной модели химической кинетики. Они также показали, что предварительное возбуждение молекулярных колебаний  $H_2$  приводит к заметному (в несколько раз) сокращению длины зоны индукции за головной наклонной ударной волной и расстояния, на котором происходит образование стационарного детонационного скачка.

В разделе 7 рассмотрены различные физико-химические процессы, ответственные за образование экологически опасных газовых и аэрозольных компонентов в камерах сгорания и струях реактивных двигателей.

В работе *Лебедева А. Б., Секундова А. Н., Савельева А. М., Старицк А. М. и Титовой Н. С.* предложена методика расчета эмиссионных характеристик авиационного двигателя, основанная на реакторной модели для диффузионной камеры сгорания и квазиодномерной модели для расчета течения газа в турбине, камере смешения и сопле. Численный анализ, проведенный для взлетного, крейсерского и номинального режимов работы двигателя, показал, что снижение тяги двигателя (от 100% до 30%) приводит к заметному уменьшению индексов эмиссии  $NO_x$  и  $H_2SO_4$  (в 2–3 раза) и к сильному росту индексов эмиссии CO, несгоревших углеводородов  $C_xH_y$  и органики  $CH_2O$ . Сравнение с данными натурных экспериментов показало, что разработанная модель обладает высокой предсказательной способностью не

только для описания эмиссии  $\text{NO}_x$  и  $\text{CO}$ , но и органических соединений.

В статье *Савельева А. М., Рейн О. Э. и Старика А. М.* численно исследуется образование раствора  $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$  на поверхности сажевых частиц в струе двигателя коммерческого дозвукового самолета. Показано, что количество осажденного на поверхности сажевых частиц раствора  $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$  зависит от количества серы в топливе. При этом для достаточно мелких сажевых частиц с радиусом менее 10 нм доминирующим механизмом образования сульфатного раствора на поверхности частицы является коагуляция сульфатного аэрозоля с сажевыми частицами, а для более крупных — гетерогенная бинарная нуклеация  $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$  из газовой фазы.

В следующей статье *Савельев А. М., Рейн О. Э. и Старик А. М.* проанализировали особенности формирования кристаллической фазы в бинарном растворе  $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$ , осажденном на сажевых частицах, эмитируемых двигателем самолета на крейсерском режиме полета. Они рассмотрели основные теоретические аспекты процесса формирования ядер кристаллизации в растворе  $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$  и привели численные оценки динамики и условий замерзания такого раствора в выхлопной струе реактивного двигателя. Показано, что только в результате лавинообразной конденсации паров  $\text{H}_2\text{O}$  на сажевых частицах и, как следствие, формирования слабого раствора  $\text{H}_2\text{SO}_4$  в капле возможно замерзание такого раствора на крейсерском режиме полета.

В последней статье раздела *Савельев А. М. и Старик А. М.* рассмотрели влияние неоднородности распределения молекулярных и ионных кластеров в выхлопной струе реактивного двигателя на формирование жидкых аэрозольных частиц в следе самолета. На основе сопоставления с экспериментальными данными проводится критический анализ моделей образования жидких аэрозольных частиц в выхлопной струе реактивного двигателя. Определены области, в которых происходит рождение нейтральных и заряженных сульфатных частиц.

В заключение я хочу поблагодарить всех сотрудников отделения 600 и коллег из других организаций, без которых публикация этого сборника была бы невозможна. Особую благодарность хочу выразить руководству Центрального института авиационного моторостроения

им. П. И. Баранова и лично Генеральному директору Скибину Владимиру Алексеевичу и Первому заместителю Генерального директора Солонину Валентину Ивановичу, которые инициировали написание этого сборника и проявили искреннюю заинтересованность в его издании.

г. Москва

*A. M. Старик*