ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЧ РАЗРЯДА В СМЕСЯХ ЭТАНОЛА И ВОДЫ [[1]](#footnote-1)\*)

Лебедев Ю.А., Татаринов А.В., Эпштейн И.Л., Титов А.Ю**.**

Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
119991, г. Москва, Ленинский проспект, 29, lebedev@ips.ac.ru

В последние десятилетия. большое внимание исследователей привлекают разряды в жидкостях и в контакте с ними, из-за возможностей решения различных прикладных задач. В частности, для получения водорода используются разряды в смеси этанола и воды. Используются различные типы электрических разрядов, но наименее исследованы микроволновые разряды. Настоящая работа продолжает наш цикл работ по моделированию СВЧ разряда в жидкостях и посвящена изучению кинетических процессов в газовой смеси продуктов разложения смеси этанола с водой. Расчеты проводились для атмосферного давления в нульмерном приближении.

Используемая модель содержит балансные уравнения для нейтральных и заряженных газовых компонент плазмы, уравнение Больцмана для свободных электронов плазмы, уравнение для среднего СВЧ поля в малом объеме, заполненным плазмой [1] и уравнение для температуры газовой смеси. Для описания термических процессов используется набор реакций San Diego Mechanism [2]. Добавлены реакции с заряженными частицами. При расчете температуры газа предполагалось, что энергия, требуемая для осуществления процессов под электронным ударом берется у электронов. Для определения функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) используется уравнение Больцмана, записанное в двучленном приближении разложения ФРЭЭ по сферическим гармоникам. Константы скорости реакций электронных процессов рассчитываются с помощью набора соответствующих сечений реакций и ФРЭЭ и являются функциями значений приведенного поля E/N. В данной работе ФРЭЭ была рассчитана с помощью программы BOLSIG+ [3] и набору сечений столкновений электронов с молекулами смеси. В кинетическую модель ,для этанола были включены процессы прямой ионизации, диссоциации, диссоциативного прилипания и ассоциативного отлипания. Модель включает положительно и отрицательно заряженные ионы: H2O+, H3O+, H5O2+, H3O+(H2O), H3O+(H2O)2, H3O+(H2O)3, O2+, СH3O+, C2H5O+, C2H5OH+, CH3+, C2H3+, H-, O-, OH-, C2H5OH-, CO-.

Проведенные нами расчеты позволяют проанализировать роль различных реакций в процессах диссоциации смеси, образования нейтральных продуктов, в частности водорода, и в образования и гибели отрицательно и положительно заряженных частиц для различных значений E/N и температуры газа. Основными продуктами разложения смеси являются водород, монооксид углерода и ацетилен. Концентрации водорода и монооксида углерода, полученные в расчетах, совпадают с экспериментальными данными [4].

Работа выполнена в рамках государственной программы ИНХС РАН при частичной поддержке гранта РФФИ № 21-52-53012.

Литература

1. Гильденбург В.Б. , Семенов В.Е. Физика плазмы (1980) т.6, вып.2 , стр.445
2. <https://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>
3. <https://fr.lxcat.net/solvers/BolsigPlus/index.php.__>
4. Tonghui Zhu , Bing Sun \*, Xiaomei Zhu , Liru Wang , Yanbin Xin , Jinglin Liu Journal of Analytical and Applied Pyrolysis (2021) 156 105111
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLIX/Lt/en/EN-Tatarinov_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)