

ВРЕМЕНА ЗАДЕРЖКИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ СМЕСЕЙ ВОДОРОД/СИЛАН/ВОЗДУХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Д.А. Тропин, Е.С. Боченков, А.В. Фёдоров

*Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия*

Силан – SiH_4 , является основным источником кремния для электроники, т.к. он даёт чистый кремний. К примеру, кварцевый песок даёт грязный кремний, т.е. с большим количеством примесей. Силан является пирофорным газом, т.е. при контакте с воздухом он может самовоспламениться даже при комнатных температурах. Чтобы эффективно предотвращать взрывы силана, которые могут произойти при катастрофических утечках газа из емкостей хранения, следует разрабатывать теорию воспламенения, горения и детонации облаков силана в открытых и замкнутых пространствах. Это позволит найти критерии взрыво- и пожаробезопасности промышленных производств.

Физико-математическая постановка задачи. Рассмотрим ударную трубу, заполненную реагирующей газовой смесью (водород/силан/воздух). Пусть в ударной трубе распространяется ударная волна (УВ), отражается от торца и воспламеняет газовую смесь. Математическая модель механики реагирующей смеси газов представляет собой систему уравнений неравновесной газовой динамики с учетом детальной химической кинетики превращений в газовой смеси, представленная в [1].

Результаты расчётов. С использованием данной математической модели были рассчитаны времена задержки воспламенения смесей водород/силан/воздух при низких температурах (от 300 до 900 К) и низких давлениях (от 0.4 до 1 атм) смеси за отраженной УВ. На рис. 1-2, для примера, представлены зависимости времени задержки воспламенения смесей $1.2H_2 + 0.2SiH_4 + Air$ и $0.5SiH_4 + Air$ от температуры за фронтом отраженной УВ при давлениях от 0.4 до 1 атм. Видно, что данные зависимости имеют немонотонный характер. Ранее в работах [2-4] экспериментально были получены подобные немонотонные зависимости времени задержки воспламенения от температуры для смесей различных углеводородов. Область, в которой время задержки воспламенения возрастает с увеличением температуры смеси, была названа «отрицательный температурный коэффициент» (negative temperature coefficient). В данной работе эта область была получена для смесей силан/водород/воздух различного состава и смеси силан-воздух. В таблице 1 приведены границы данной области: температура T_1 соответствует началу области, T_2 – концу; ΔT – длина области. Видно, что по мере увеличения доли водорода в силано-воздушной смеси длина области «отрицательного температурного коэффициента» уменьшается с 303 до 241 К. Из рис. 1-2 следует, что увеличение давление не приводит к изменению границы начала области, но приводит к сдвигу границы конца области в сторону более высоких температур. Так, в таблице 1 температура T_2 представлена как диапазон температур, границы которого соответствуют минимальному и максимальному значениям рассматриваемого диапазона давлений.

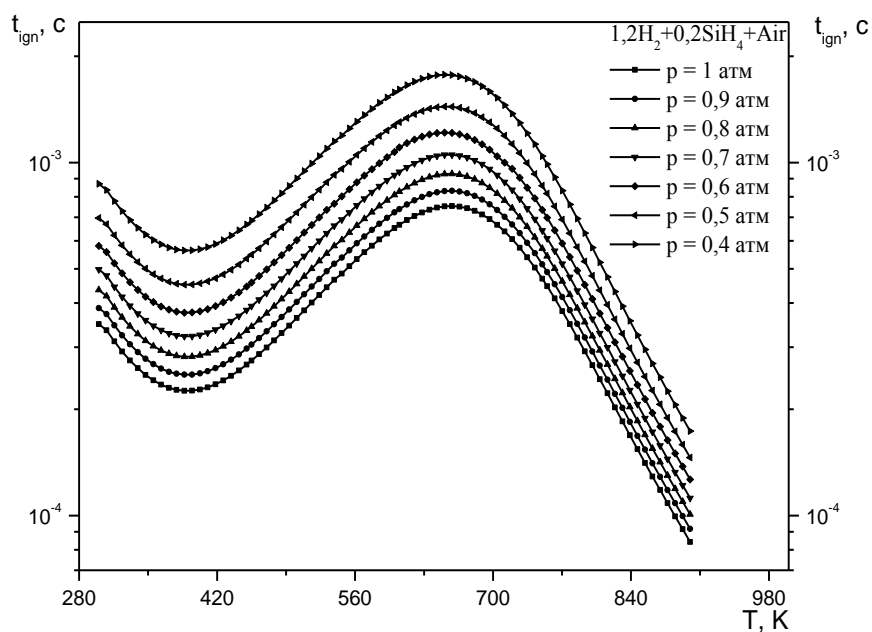


Рис. 1. Зависимость времени задержки воспламенения смеси $1.2H_2 + 0.2SiH_4 + Air$ от температуры за фронтом отраженной УВ.

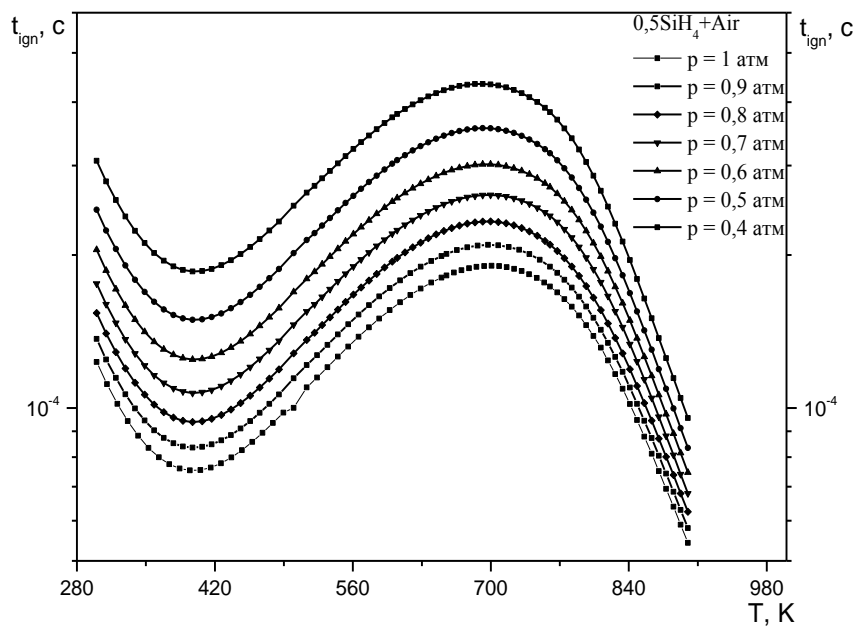


Рис. 2. Зависимость времени задержки воспламенения смеси $0.5SiH_4 + Air$ от температуры за фронтом отраженной УВ.

Таблица 1. Зависимость области отрицательного температурного коэффициента от концентрации в смеси силана.

Смесь	T_1 , К	T_2 , К	ΔT , К
$1.6H_2 + 0.1SiH_4 + Air$	379	620-628	241-249
$1.2H_2 + 0.2SiH_4 + Air$	387	651-658	264-271
$0.8H_2 + 0.3SiH_4 + Air$	394	666-673	272-279
$0.4H_2 + 0.4SiH_4 + Air$	395	681-689	286-294
$0.5SiH_4 + Air$	397	692-700	295-303

Выводы. На основе разработанной физико-математической модели воспламенения смесей силан/водород/воздух рассчитаны времена задержки воспламенения смесей водород/силан/воздух в диапазонах температур [300 К; 900 К] и давлений [0,4 атм; 1 атм]. Показано, что зависимости времени задержки воспламенения от температуры рассматриваемых смесей имеют немонотонный характер. На данных зависимостях присутствует область «отрицательного температурного коэффициента». Увеличение давления смеси не приводит к изменению границы начала области «отрицательного температурного коэффициента», но приводит к сдвигу границы конца данной области в сторону более высоких температур. Увеличение доли водорода в силано-воздушной смеси приводит к уменьшению длины области «отрицательного температурного коэффициента» с 303 до 241 К.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда (проект № 17-69-00006)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тропин Д. А., Фёдоров А. В. Физико-математическое моделирование воспламенения и горения силана в проходящих и отраженных ударных волнах // Физика горения и взрыва. 2015. Т.51, №4, с. 37-45.
2. Minetti R., Ribaucour M., Carlier M., Fittschen C., Sochet L. R.. Experimental and Modeling Study of Oxidation and Autoignition of Butane at High Pressure // Combustion and flame. 1994. V. 96, p. 201-211.
3. Barckholtz T.A. Modeling the Negative Temperature Coefficient in the Low Temperature Oxidation of Light Alkanes // Am. Chem. Soc., Div. Fuel Chem. 2003. V.48, No.2, pp 518-519.
4. Wilk R.D., Cernansky N.P., Cohen R.S. The Oxidation of Propane at Low and Transition Temperatures // Combust. Sci. and Tech. 1986. V.49, pp. 41-78.