

УТВЕРЖДАЮ:

Директор Научно-исследовательского института ядерной физики
им. Д.В. Скобельцына федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
“Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”

Профессор, д.ф.-м.н., Панасюк Михаил Игоревич

исследователь
г. ядерной физики
Д.В. Скобельцына
федерального государственного
университета
имени М.В. Ломоносова

2015 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Научно-исследовательского института ядерной физики им. Д.В. Скобельцына федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”.

Диссертация «Исследование кинетических процессов с участием возбуждённого в плазме синглетного кислорода в кислород-йодных и водород-кислородных газовых потоках» выполнена в отделе микроэлектроники НИИ ядерной физики МГУ им. М.В. Ломоносова.

В период подготовки диссертации соискатель, Чукаловский Александр Александрович, работал в отделе микроэлектроники НИИ ядерной физики МГУ им. М.В. Ломоносова в должности научного сотрудника.

В 2008 г. окончил Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова по специальности Физика.

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2011 г. федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования “Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова”.

Научный руководитель - Рахимова Татьяна Викторовна, к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник отдела микроэлектроники НИИ ядерной физики МГУ им. М.В. Ломоносова

По итогам обсуждения принято следующее заключение.

Целью диссертационной работы ставилось исследование и детальное описание кинетических процессов в кислород-йодных и водород-кислородных газовых средах с участием возбуждённых в плазме газового разряда молекул синглетного кислорода (СК) - $O_2(^1\Delta_g)$, применительно к задачам: 1) повышения эффективности создания инверсии в рабочей среде кислород-йодного лазера с электроразрядной генерацией СК, 2) создания детальных кинетических схем с участием электронно-возбуждённых состояний для описания процессов, протекающих в топливо-содержащих смесях с плазменной активацией окислителя.

Выполненная работа:

Соискателем разработаны численные газодинамические модели (в т.ч. двумерная $2-D(r,z)$) для анализа и детального описания процессов в кислород-йодных и водород-кислородных газовых потоках.

Проведено описание кинетики и транспорта в зоне смешения кислород-йодного лазера с электроразрядным генератором синглетного кислорода (КИЛ с ЭР ГСК). Найдены оптимальные режимы работы КИЛ с ЭР ГСК на основе ВЧ - разряда с рекордной наработкой СК, созданного на базе НИИЯФ МГУ.

Проведен детальный анализ кинетики процессов в смесях $H_2-O_2-O_2(^1\Delta_g)$ с учётом имеющегося в литературе набора экспериментальных данных в диапазоне температур 300 - 1000 К. Проанализировано влияние активации окислителя на воспламенение кислород-водородной смеси в проточном реакторе. Проанализирован механизм и каналы химической реакции $H+O_2(^1\Delta_g)\rightarrow products$. Разработана детальная кинетическая модель для описания процессов в смесях $H_2-O_2-O_2(a^1\Delta_g)$ с учётом электронно-возбуждённых радикалов HO_2^* .

Результаты и их новизна:

1. Разработана самосогласованная двумерная (в (r,z) -геометрии) газодинамическая модель с учётом детальной химической кинетики для анализа транспорта и смешения реагирующих газовых потоков.

2. На основе численного анализа процессов в зоне смешения КИЛ с ЭР ГСК в смеси $I_2/He-O_2/O_2(^1\Delta_g)/O$ показано, что диссоциация I_2 в реакциях с атомами O , реакция накачки возбуждённого состояния $I^*(^2P_{1/2})$, а также тушение $I^*(^2P_{1/2})$ и $O_2(^1\Delta_g)$ на атомах O являются процессами, определяющими температурный режим и коэффициент усиления (КУ). Получена оценка константы скорости реакции $I^*(^2P_{1/2})+O\rightarrow I(^2P_{3/2})+O$. Продемонстрирована необходимость снижения концентрации атомов O в зоне смешения КИЛ для увеличения КУ. Для модельной системы непрерывного дозвукового КИЛ с ЭР ГСК на основе ВЧ-разряда найден оптимальный режим по расходу и степени предварительной диссоциации потока йода.

3. Проведен анализ кинетических процессов в системе $H_2-O_2-O_2(^1\Delta_g)$ в диапазоне температур 300-1000 К. Впервые показано, что константа скорости тушения электронно-возбуждённых состояний молекулы $HO_2^*(^2A')$ не превышает константы скорости V-T релаксации молекул $HO_2(v)$. На основе моделирования данных экспериментов в проточных реакторах и ударных трубах в смесях $H/H_2-O_2/O_2(^1\Delta_g)/O$ получены оценки констант скоростей процессов с участием молекул $O_2(^1\Delta_g)$ и HO_2 .

4. Впервые проведено полное численное моделирование эксперимента по воздействию наработанного в ДС-разряде $O_2(a^1\Delta_g)$ на длину индукции в смеси $H_2-O_2-O_2(a^1\Delta_g)$. Показано, что даже в случае принудительного удаления атомов O из потока возбуждённого кислорода именно остаточные доли нечётного кислорода ($O+O_3$) инициируют процесс окисления водорода в смеси $H_2-O_2-O_2(^1\Delta_g)$, нивелируя роль реакции $H_2+O_2(a^1\Delta_g)\rightarrow H+HO_2$. Получено, что реакция $H+O_2(a^1\Delta_g)\rightarrow O+OH$ является ключевой для ускорения воспламенения смеси $H_2-O_2-O_2(a^1\Delta_g)$. Впервые получено значение константы скорости реакции $H+O_2(a^1\Delta_g)\rightarrow O+OH$ при температуре 780 К.

5. Предложен новый механизм реакции $H+O_2(^1\Delta_g)\rightarrow products$ и её каналов с учётом взаимодействия нижних электронных состояний $^2A'$ и $^2A''$ молекулы HO_2 за счёт эффекта Реннера-Теллера. Дано объяснение высокой вероятности спин-запрещённой реакции $H+O_2(^1\Delta_g)\rightarrow H+O_2(^3\Sigma)$ за счёт быстрой конверсии состояний $^2A''$ и $^2A'$ вблизи линейной

геометрии молекулы HO_2 . Впервые на основе моделирования эксперимента по тушению $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ в бедной $\text{H}_2\text{-O}_2$ смеси за фронтом ударной волны в диапазоне температур 500 - 1000 К была получена зависимость константы скорости реакции $\text{H}+\text{O}_2(^1\Delta_g)(+\text{M})\rightarrow\text{HO}_2(^2\text{A}',^2\text{A}'')(+\text{M})$ от давления.

6. На основе моделирования экспериментов в смеси $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-O}_2(^1\Delta_g)$ в диапазоне температур 300 - 1000 К получена температурная зависимость константы скорости реакции $\text{H}+\text{O}_2(^1\Delta_g)\rightarrow\text{O}+\text{OH}$ и дана оценка её погрешности.

7. На основе полученных данных разработана оригинальная детальная кинетическая модель для описания процессов в смесях $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-O}_2(^1\Delta_g)$ с учётом электронно-возбуждённых молекул HO_2^* . Данная модель позволяет описать имеющиеся экспериментальные данные по задержке воспламенения и эволюции концентрации компонентов в широком диапазоне температур, давлений и состава смеси.

Личный вклад:

Соискателем разработаны численные газодинамические модели (в т.ч. двумерная $2\text{-D}(r,z)$) для анализа и детального описания процессов в кислород-йодных и водород-кислородных газовых потоках. Все приведенные в диссертационной работе результаты по анализу и моделированию рассматриваемых систем получены лично соискателем.

Достоверность результатов:

Достоверность полученных в работе результатов обусловлена корректностью и обоснованностью применяемых теоретических методов и моделей, согласием полученных с использованием разработанных математических моделей результатов с экспериментальными данными в широких диапазонах варьируемых параметров.

Практическая значимость и ценность работ соискателя:

Практическая значимость полученных результатов заключается в том, что созданные модели могут быть использованы для анализа, проведения прогностических оценок и оптимизации параметров реагирующих газовых потоков с учётом различной геометрии системы транспорта и смешения, а также детальной химической кинетики. В частности для оптимизации параметров КИЛ с ЭР ГСК в различных режимах работы с целью увеличения коэффициента усиления и мощности выходного излучения, а также исследования кинетики топливо-содержащих смесей в проточных реакторах с плазменной активацией окислителя.

Разработанная кинетическая модель кинетических процессов в смесях $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-O}_2(^1\Delta_g)$ может быть использована для проведения дальнейших работ по созданию детальной модели плазмохимических процессов в различных топливо-содержащих смесях ($\text{H}_2\text{-O}_2/\text{воздух}$; $\text{C}_x\text{H}_y/\text{воздух}$). Кроме того, полученные данные по кинетике $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-O}_2(^1\Delta_g)$ могут использоваться также при моделировании процессов, протекающих в верхней и средней атмосфере.

Основное содержание диссертации отражено в 19 публикациях, в том числе в 8 статьях в реферируемых журналах и 11 материалах российских и международных конференций.

Публикации в журналах:

1. А. А. Чукаловский, К. С. Клоповский, Т. В. Рахимова, «Численное моделирование влияния примесей атомарного кислорода на формирование инверсии при осесимметричном смешении потока йода с возбуждённым кислородом», Письма в ЖТФ, 2008, Т.34, Вып.18, СС.61-69.
2. Чукаловский А.А., Клоповский К.С., Рахимова Т.В.//«Численное моделирование кинетики смешения йодсодержащего потока с потоком кислорода, возбужденного электроразрядным генератором», «Вестник Московского Университета. Серия 3. Физика. Астрономия», №5, СС. 29-33.
3. Чукаловский А.А., Рахимова Т.В., Клоповский К.С., Манкелевич Ю.А., Прошина О.В., «Исследование кинетики кислород-йодного лазера с электроразрядной генерацией синглетного кислорода при использовании двумерной газодинамической модели», Физика Плазмы, 2011, том 37, № 3, С.277-289.
4. М.А.Либерман, М.Ф.Иванов, А.Д.Киверин, М.Кузнецов, Т.В.Рахимова, А.Чукаловский, «О механизме перехода медленного горения в детонацию в водород-кислородной смеси», ЖЭТФ, 2010 г., Том 138, Вып. 4, стр. 772.
5. M.A. Liberman, M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, M.S. Kuznetsov, A.A. Chukalovsky, T.V. Rakhimova, "Deflagration-to-detonation transition in highly reactive combustible mixtures", Acta Astronautica, Volume 67, Issues 7-8, October-November 2010, PP. 688-701.
6. A. A. Chukalovsky, K. S. Klopovsky, M. A. Liberman, Yu. A. Mankelevich, N. A. Popov, O. V. Proshina, T. V. Rakhimova, "Study of Singlet Delta Oxygen $O_2(^1\Delta_g)$ Impact on H_2-O_2 Mixture Ignition in Flow Reactor: 2D Modeling", Combustion Science and Technology, 2012, Volume 184, Issue 10-11 pp. 1768-1786.
7. А. А. Чукаловский, Т. В. Рахимова, К. С. Клоповский, Н. А. Попов, Ю. А. Манкелевич, и О. В. Прошина, «Особенности кинетики $H_2-O_2-O_2(^1\Delta_g)$ смесей. Часть I: Образование и тушение электронно-колебательно возбужденных молекул $HO_2^*(A')$ в $H_2-O_2-O_2(^1\Delta_g)$ смесях при температуре 300 К,» *Физика Плазмы*, Т. 40, №. 1, pp. 44–62, 2014.
8. А. А. Чукаловский, Т. В. Рахимова, К. С. Клоповский, Ю. А. Манкелевич, и О. В. Прошина, «Особенности кинетики $H_2-O_2-O_2(^1\Delta_g)$ смесей. Часть II: Тушение возбужденного в разряде $O_2(^1\Delta_g)$ за фронтом ударной волны при температуре 500–1020 К,» *Физика Плазмы*, Т. 40, №. 1, pp. 63–76, 2014.

Материалы диссертации докладывались на конференциях лично автором:

9. Чукаловский А.А.// Численное моделирование кинетических процессов в кислород-йодном лазере с электроразрядным генератором синглетного кислорода // XIV Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов 2007», Москва, МГУ, 11–14 апреля 2007 г., http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2007/18/chukalovsky.doc.pdf
10. Чукаловский А.А., Клоповский К.С., Рахимова Т.В. // "Численное моделирование кинетических процессов в кислород-йодном лазере с электроразрядным генератором синглетного кислорода"// Всероссийская конференция по физике

- низкотемпературной плазмы ФНТП-2007, Петрозаводск, 24-28 июня 2007 г., Т.1, С. 149-154.
11. Chukalovsky A.A., Klopovsky K. S., Rakhimova T. V., Mankelevich Y.A. and Proshina O.V.//The analysis of OIL with EDSOG on two-dimensional gas-dynamic model, GEC, Paris 4-8 october 2010, Bulletin of American Physical Society, October 2010, Volume 55, No.7, P.157, SF1 2.
 12. Чукаловский А.А., Рахимова Т.В., Клоповский К.С., Манкелевич Ю.А., Прошина О.В.// "Исследование дозвукового КИЛ с ЭРГСК на двумерной газодинамической модели с детальной кинетикой"// XIII Школа молодых ученых «Актуальные проблемы физики» и IV Всероссийская Школа-семинар «Инновационные аспекты фундаментальных исследований», ФИАН, 2010, Звенигород, 14-19 ноября 2010, Сборник Трудов, СС.242-244.
 13. A.A.Chukalovsky, K.S.Klopovsky, M.A.Liberman, Yu.A.Mankelevich, N.A.Popov, O.V.Proshina, and T.V.Rakhimova, // Two-dimensional Modeling of the Ignition Length Decrease in Hydrogen Mixture with Oxygen Excited in Electric Discharge, 23-rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, USA, Irvine, 24-29 July 2011.
 14. A.A.Chukalovsky, K.K.Klopovsky, M.A.Liberman, Yu.A.Mankelevich, N.A.Popov, O.V.Proshina, and T.V.Rakhimova, // Study of singlet delta oxygen $O_2(1\Delta_g)$ impact on H_2-O_2 mixture ignition in flow reactor // 5th International Symposium on Non-equilibrium Processes, Plasma, Combustion, and Atmospheric Phenomena (NEPCAP 2012), October 1-6, 2012, Sochi (Loo), Russia, pp. 39 – 48.
 15. A.A.Chukalovsky, K.S.Klopovsky, T.V.Rakhimova // Peculiarities of the kinetics in $H_2-O_2-O_2(1\Delta_g)$ mixtures // 5th Central European Symposium on Plasma Chemistry, 25-29 August 2013, Balatonalmádi, Hungary.
 16. A. A. Chukalovsky, K. S. Klopovsky, A. P. Palov, and T. V. Rakhimova, // Peculiarities of $O_2(a^1\Delta_g)$ kinetics in reactions with H atoms // 22nd International Symposium on Plasma Chemistry (IPSC 22), Antwerp, Belgium, 2015, pp. 1 – 4.

а также представлялись в докладах:

17. A. D. Kiverin, A. A. Chukalovsky, M. F. Ivanov, M. A. Liberman, // Detonation Initiation by a Temperature Gradient for a Detailed Chemical Reaction Models, 23-rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, USA, Irvine, 24-29 July 2011.
18. M. A. Liberman, M. F. Ivanov, A. D. Kiverin, M. S. Kuznetsov, A. A. Chukalovsky, T. V. Rakhimova // Deflagration-to-Detonation Transition in Highly Reactive Combustible Mixtures, 23-rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, USA, Irvine, 24-29 July 2011.
19. M.A. Liberman, M.F. Ivanov, A.D. Kiverin, M.S. Kuznetsov, A.A. Chukalovsky, T.V. Rakhimova // Deflagration-to-Detonation Transition in Highly Reactive Combustible Mixtures, 28th International Symposium on Shock Waves; Manchester, UK, 17 - 22 July 2011.

Диссертация

«Исследование кинетических процессов с участием возбуждённого в плазме синглетного кислорода в кислород-йодных и водород-кислородных газовых потоках»,

Чукаловского Александра Александровича,

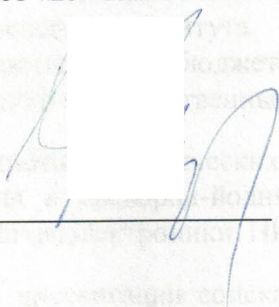
Рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 - Физика плазмы.

Заключение принято на заседании Совета ОМЭ НИИЯФ МГУ

Присутствовало на заседании 12 чел.

Результаты голосования: «за» - 12 чел, «против» - 0 чел. «воздержалось» - 0 чел.

Протокол № 05-15-05 от «25» мая 2015 г.



Рахимов Александр Турсунович,
д.ф.- м.н., профессор,
заведующий ОМЭ НИИЯФ МГУ