

化学动力学和分子动态学

空气污染组分H₂O和CO₂对乙烯燃烧性能的影响(II)——反应机理和动力学模拟

邵菊香, 谈宁馨, 刘伟雄, 李象远

四川大学化工学院, 成都 610065; 宜宾学院计算物理重点实验室, 四川 宜宾 644000; 中国空气动力研究与发展中心, 四川 绵阳 621000

摘要:

超燃冲压发动机在高空工作时, 以高温高速纯净空气作氧化剂使燃料燃烧. 但在地面实验中, 高温空气往往通过燃烧加热方式获得, 会使空气中含有H₂O和CO₂等污染组分. 本文用活塞流反应器进行动力学模拟, 研究在不同初温、压强和燃气比的条件下, H₂O和CO₂污染组分对乙烯燃烧的温度、压强和点火延迟时间等特性的影响. 模拟结果表明: 乙烯在含有H₂O/CO₂污染物的空气中燃烧, 相比纯净的空气而言, H₂O对乙烯的点火有一定的促进作用, 而CO₂有一定的抑制作用; 空气中含有H₂O和CO₂污染物使乙烯燃烧的平衡温度和压强降低, 在污染物浓度相同时, CO₂引起的下降幅度比H₂O的大. 模拟结果能较好地解释现有的实验现象.

关键词: 动力学模拟 活塞流反应器 乙烯燃烧 污染组分

收稿日期 2009-09-07 修回日期 2009-10-28 网络版发布日期 2009-12-08

通讯作者: 李象远 Email: xyli@scu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 程兆年, 丁弘, 雷雨, 许立. RbCl 溶解的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(10): 890-895
2. 周国荣; 吴佑实; 张川江; 赵芳. 二十面体准晶对非晶形成影响的模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(01): 13-16
3. 黄世萍, 刘洪霖, 马彦会, 唐波, 陈念贻. ZnCl₂ 熔盐的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 71-73
4. 黄世萍; 马彦会; 唐波; 徐桦; 陈念贻. NaCl-NaBr 系熔盐溶液的分子动力学研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1045-1048
5. 程兆年; 郝正明; 许立; 陈念贻. 熔融NaCaF₃、Na₂CaF₄和Na₃CaF₅的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 676-679
6. 吴晓萍; 刘志平; 汪文川. 分子模拟研究气体在室温离子液体中的溶解度[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1138-1142
7. 刘春莉; 李春华; 陈慰祖; 王存新. 用分子模拟方法研究HIV-1整合酶与咖啡酰基类抑制剂的相互作用[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1229-1234
8. 苑世领; 吴锐; 蔡政亨. 水溶液中嵌段共聚物的耗散颗粒动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 811-815
9. 张爱龙; 刘让苏; 梁佳; 郑采星. 冷却速率对液态Ni凝固过程中微观结构演变影响的模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 347-353
10. 张弢; 谷廷坤; 齐元华. 熔体快速凝固过程的微观结构演化[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 173-176
11. 秦绪波; 张妍宁; 鲁剑林. 原子尺寸差异与非晶形成能力[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1163-1166
12. 殷开梁; 徐端钧; 夏庆; 叶雅静; 邬国英; 陈正隆. 正十六烷体系凝固过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 302-305
13. 王舜; 高庆宇; 王新红; 林娟娟; 赖顺安; 莫言学. 亚氯酸盐-硫代硫酸盐非缓冲体系的动力学[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 762-765
14. 刘新; 孟长功; 刘长厚. 金属银在高升温速率下的熔化和过热行为[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 280-284
15. 邵俊; 徐桦; 陆文聪; 陈念贻. 高压Na₂O-SiO₂系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 237-239
16. 张弢; 张晓茹; 吴爱玲; 管立; 徐昌业. 金属铜升温熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 709-713
17. 张荣; 谭载友; 郑敦胜; 罗三来; 李浩然. 特殊缔合体系TFE水溶液分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 428-432
18. 崔宝秋; 宫利东; 赵东霞. 微过氧化物酶水溶液的ABEEM/MM动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06):

扩展功能

本文信息

PDF(297KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 动力学模拟

▶ 活塞流反应器

▶ 乙烯燃烧

▶ 污染组分

本文作者相关文章

▶ 邵菊香

▶ 谈宁馨

▶ 刘伟雄

▶ 李象远

19. 张军;赵卫民;郭文跃;王勇;李中谱.苯并咪唑类缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J].物理化学学报,2008,24(07):1239-1244
20. 沈秋婵;梁婉春;胡兴邦;李浩然.甲酰胺水溶液的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2008,24(07):1169-1174
21. 沈新媛 吕洋 李慎敏.人体端粒中(3+1)混合结构G-四链体稳定性的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(04):783-791
22. 崔巍 张怀 计明娟.新型二氟甲基磷酸类酪氨酸蛋白磷酸酯酶1B抑制剂的分子动力学模拟和结合自由能计算[J].物理化学学报,2009,25(04):668-676
23. 赵勇山 郑清川 张红星 楚慧郢 孙家钟.人类丝氨酸消旋酶的同源模建及其与多肽类抑制剂的分子对接[J].物理化学学报,2009,25(03):417-422
24. 潘国祥;倪哲明;王芳;王建国;李小年.二氟尼柳/水滑石插层组装结构、氢键及水合特性的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(02):223-228
25. 陈聪 李维仲.甘油水溶液氢键特性的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(03):507-512
26. 刘让苏,周群益,李基永.液态金属结构变化的分子动力学模拟研究[J].物理化学学报,1995,11(08):755-757
27. 顾健德,田安民,鄢国森.N₂、O₂水溶液光谱的分子动力学模拟[J].物理化学学报,1995,11(08):719-723
28. 周震;言天英;高学平.储能材料的模拟与设计[J].物理化学学报,2006,22(09):1168-1174
29. 张妍宁;王丽;边秀房.中介尺度Au纳米团簇熔化的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2003,19(01):35-39
30. 吴晓萍;刘志平.室温离子液体[bmim][BF₄]和水混合物的计算机模拟研究[J].物理化学学报,2005,21(09):1036-1041
31. 方美娟;骆书娜;王河清;刘万云;赵玉芬.磷酸化对丙氨酸与溶菌酶相互作用的影响[J].物理化学学报,2005,21(09):1042-1045
32. 刘迎春;王琦;吕玲红;章连众.疏水性微孔中水的结构和扩散性质的分子模拟[J].物理化学学报,2005,21(01):63-68
33. 孙浩 蒋勇军 俞庆森 邹建卫.分子动力学模拟方法研究结构水在糖原合成酶激酶-3β中的作用[J].物理化学学报,2009,25(04):635-639
34. 宋其圣,郭新利,苑世领,刘成卜.十二烷基苯磺酸钠在SiO₂表面聚集的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(06):1053-1058
35. 付一政,刘亚青,兰艳花.端羟基聚丁二烯/增塑剂混合物相容性的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(07):1267-1272
36. 赵健伟,刘洪梅,倪文彬,郭彦,尹星.从分子水平研究电子传递[J].物理化学学报,2009,25(07):1472-1480
37. 李振泉;郭新利;王红艳;李青华;苑世领;徐桂英;刘成卜.阴离子表面活性剂在油水界面聚集的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(01):6-12
38. 蔡开聪 王建平.乙醇醛的分子动态结构[J].物理化学学报,2009,25(04):677-683
39. 陈莹;王秀英;赵俊卿.小尺寸金属团簇熔化过程的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2008,24(11):2042-2046
40. 胡建平;柯国涛;常珊;陈慰祖;王存新.HIV-1病毒DNA与整合酶结合后的构象变化[J].物理化学学报,2008,24(10):1803-1810
41. 付一政;刘亚青;梅林玉;兰艳花.HTPB与Al不同晶面结合能和力学性能的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(01):187-190
42. 李姝;刘磊;曹臻;汪继强;言天英.室温熔盐二(三氟甲基磺酸酐)亚胺锂-尿素体系的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2007,23(07):983-986
43. 杨志忠;崔宝秋.血红素近轴侧基氢键的ABEEM/MM分子动力学模拟[J].物理化学学报,2007,23(09):1332-1336
44. 彭传校;王丽;张妍宁.应变率诱发镍纳米丝的非晶化[J].物理化学学报,2007,23(04):517-520
45. 丛红日;边秀房;李辉;王丽.液态Al₈₀Fe₂₀合金的中程有序结构[J].物理化学学报,2002,18(01):39-44
46. 徐桦;邵俊.氟代硼酸锂玻璃的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2002,18(01):10-13
47. 王丽;衣粟;边秀房.Ni₃Al合金液态与非晶中的原子团簇 [J].物理化学学报,2002,18(04):297-301
48. 朱小蕾;周志华;卢文庆;黄锦凡;彭盘英.由CBr₄分子动力学研究观察到的可能的新相[J].物理化学学报,1997,13(09):815-821
49. 王丽;边秀房;李辉.金属Cu液固转变及晶体生长的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2000,16(09):825-829
50. 侯怀宇;陈国良;陈光.金属Ni熔化前后结构变化的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2006,22(07):771-776

51. 徐桦;邵俊.正磷酸铝高压下相变的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 512-516
52. 计明娟;叶学其;杨鹏程.甲硫氨酸-脑啡肽的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1011-1016
53. 李辉;边秀房;李玉忱;刘洪波;陈魁英.贵金属Au的液态结构分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 630-634
54. 刘新;孟长功;刘长厚.升温速率对金属铅的熔化和过热行为的影响[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 681-685
55. 雷雨;程兆年;唐鼎元.分子动力学模拟研究 β -BAB₂O₄熔体的结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 481-484
56. 程兆年;郑正明;张静;陈念贻.熔融CaF₂的径向分布函数[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 438-441
57. 程兆年;张静;郑正明;陈年贻.超离子导体CaF₂中的Ca²⁺亚晶格和F⁻亚晶格[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 390-393
58. 邵俊;汤正途.LiCl急冷玻璃形成过程中局部结构的分子动力学模拟——基于周期性边界条件的Voronoi多面体计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(05): 571-576
59. 刘伟雄, 杨阳, 邵菊香, 宋文艳, 李象远, 乐嘉陵.空气污染组分H₂O和CO₂对乙烯燃烧性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1618-1622
60. 高廷红, 刘让苏, 周丽丽, 田泽安, 谢泉.液态Ca₇Mg₃合金快速凝固过程中团簇结构的形成特性[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2093-2100
61. 丁伟, 刘国宇, 于涛, 曲广淼, 程杰成, 吴军政.烷基芳基磺酸盐的分子动力学模拟与自由能微扰计算[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0