

Ignition of Mixtures of Ammonia with Components of Model Fuels behind Shock Waves

Alexander Drakon^{1,2*}, Alexander Eremin¹

¹ Joint Institute for High Temperature RAS,
Moscow, 125412, Russia

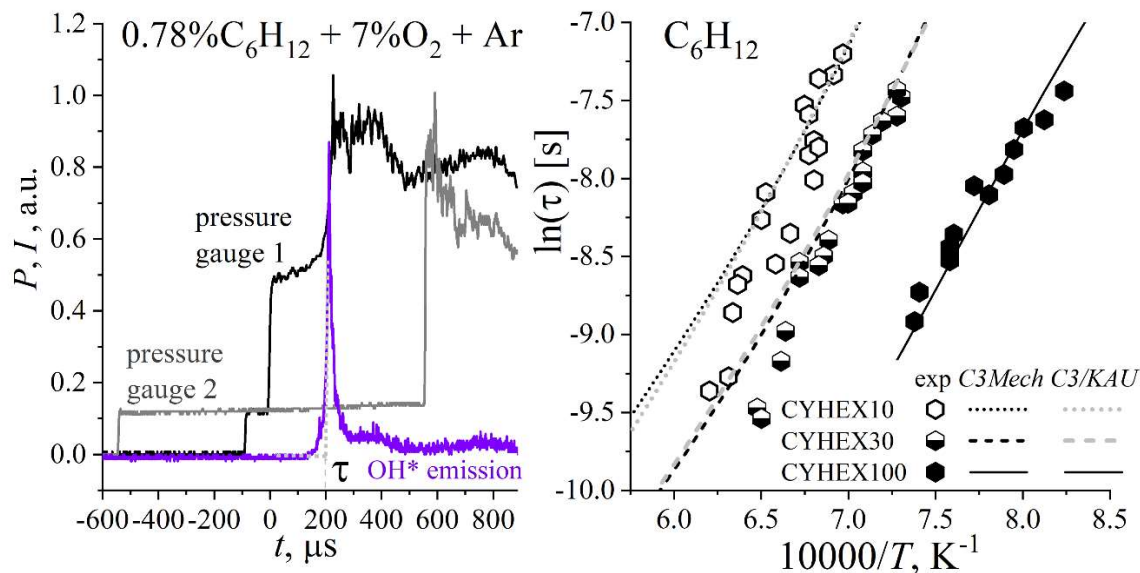
² Voevodsky Institute of Chemical Kinetics and Combustion, Siberian Branch, RAS,
Novosibirsk, 630090, Russia

drakon@jiht.ru

Abstract

This article presents the results of experimental measurements of ignition delay times for ammonia mixtures with popular model fuel components: n-heptane C_7H_{16} , cyclohexane C_6H_{12} , and toluene C_7H_8 . Ignition was observed in a shock tube of standard design behind reflected shock waves. The experimental data were compared with the results of numerical simulations obtained using the latest universal kinetic mechanism C3Mech4.0.1. Excellent agreement between experiment and calculation was demonstrated for n-heptane- and cyclohexane-doped mixtures, while for toluene ones the previously reported overestimation of predicted ignition delay times was observed.

Keywords: ignition, ammonia, n-heptane, cyclohexane, toluene



Typical experimental profiles (on the left) and temperature dependencies of ignition delay time in ammonia combustible mixtures with 100%-, 30%- and 10%-substitution of ammonia with cyclohexane C_6H_{12}

УДК 544.45

Воспламенение смесей аммиака с компонентами модельных топлив за ударными волнами

А.В. Дракон^{1,2*}, А.В. Ерёмин¹

¹ Объединенный институт высоких температур РАН,
Россия, Москва, 125412, ул. Ижорская, д.13, стр.2

² Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН,
Россия, Новосибирск, 630090, ул. Институтская, д. 3
drakon@jiht.ru

Аннотация

В статье представлены результаты экспериментальных измерений времен задержки воспламенения смесей аммиака с популярными компонентами модельных топлив, – тяжелыми углеводородами: н-гептаном C_7H_{16} , циклогексаном C_6H_{12} и толуолом C_7H_8 за отраженными ударными волнами в ударной трубе стандартной конструкции. Экспериментальные данные сопоставлены с результатами численного моделирования на основе новейшего универсального механизма C3Mech4.0.1. Продemonстрировано, что для н-гептана и циклогексана наблюдается превосходное согласие эксперимента и расчета, в то время как для толуола отмечается эффект завышения предсказываемых времен задержки воспламенения, ранее наблюдавшийся в смесях аммиака с более легкими углеводородами CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 и C_2H_6 .

Ключевые слова: воспламенение, аммиак, н-гептан, циклогексан, толуол

1. Введение

На протяжении последних нескольких лет наблюдается устойчивый рост интереса к исследованию процессов воспламенения и горения топливных смесей на основе аммиака, содержащих различные промотирующие добавки. На фоне нарастающей необходимости сокращения выбросов CO_2 и других вредных соединений в атмосферу аммиак привлек внимание научного сообщества как перспективное синтезируемое безуглеродное топливо, свободное от многих недостатков, присущих водороду [1,2]. Он сжигается при сравнительно небольших давлениях, обладает достаточно высокой плотностью энергии, имеет развитую инфраструктуру производства и хранения. К числу недостатков, осложняющих его применение в качестве самостоятельного топлива, относятся узкие пределы воспламенения и низкая скорость пламени, что и обуславливает необходимость использования смесей аммиака с более реакционноспособными соединениями.

По состоянию на 2026 год ближе всего к практическому применению топливных смесей на основе аммиака подошла отрасль морских перевозок [3]. Прошло ходовые испытания экспериментальное судно с двигателем на чистом аммиаке, эксплуатируются несколько малых судов, использующих топливные смеси на его основе, находятся в стадии строительства несколько десятков более крупных балкеров и аммиаковозов с готовыми к использованию аммиака двигательными установками [4]. Как правило, предполагается, что применяемые топливные смеси будут содержать добавку нескольких процентов дизельного топлива либо флотского мазута.

Развитие соответствующих технологий требует создания кинетических механизмов, позволяющих надежно предсказывать параметры воспламенения и горения аммиачно-углеводородных смесей. Применяемые в настоящее время жидкие топлива представляют собой смесь большого, достигающего несколько сотен, числа углеводородных соединений. Принятой практикой исследований является использование так называемых модельных топлив, являющихся смесью небольшого количества соединений и при этом воспроизводящих ключевые характеристики реальных топлив (удельную энергоемкость, октановое/цетановое число и др.). Один из подходов к расчету параметров модельной топливной смеси [5] заключается в том, что она предполагается состоящей из четырех основных компонентов: нормальных и разветвленных алканов, циклоалканов и ароматических углеводородов. В данной работе было исследовано воспламенение смесей аммиака с представителями трёх из этих классов: алканом C_7H_{16} (н-гептан), циклоалканом C_6H_{12} (циклогексан) и ароматическим соединением C_7H_8 (толуол), широко применяемыми при создании модельных топлив.

К настоящему времени опубликовано достаточно большое количество кинетических механизмов, позволяющих описать воспламенение смесей аммиака с разнообразными C_1 - C_4 углеводородами и оксигенатами, однако кинетика более крупных соединений представлена в них значительно слабее. Менее года назад в публикациях [6, 7] научному сообществу был представлен новейший механизм $C3Mech4.0.1$, являющийся на данный момент одним из наиболее универсальных. В своей полной версии он состоит из более чем двадцати тысяч реакций с участием пяти тысяч соединений, включает в том числе кинетику окисления аммиака и позволяет моделировать воспламенение его смесей с большим спектром соединений, включающих до восьми атомов углерода. Наряду с полной версией доступны подмеханизмы с меньшим числом реакций, позволяющие уменьшить вычислительную сложность расчета, а также возможность автоматизированного конструирования их под конкретную расчетную задачу [8].

Вместе с тем задача описания воспламенения аммиака как такового всё еще далека от окончательного решения. Только в 2021–2024 годах было опубликовано как минимум 36 механизмов окисления аммиака [9], которые даже для простейшей системы NH_3/O_2 не достигают консенсуса при предсказании таких макропараметров горения, как задержка воспламенения и ламинарная скорость пламени. Блок NH_3 -реакций в модели $C3Mech$ взят разработчиками из механизма $NUIG-2023$ [10], который был признан лучшим на основании интегрального тестирования в работе [11]. Следует, однако, отметить, что выбранный набор экспериментальных данных включал лишь результаты, полученные в NH_3/O_2 , $NH_3/H_2/O_2$ и $NH_3/NO/O_2$ смесях с различными разбавителями (He , Ar , N_2), то есть способность механизмов описывать параметры воспламенения смесей аммиака с углеродными соединениями не оценивалась. Второе место с минимальным отрывом в сравнении [11] занимает механизм $KAUST$ [12], продемонстрировавший наилучшее согласие с экспериментальными данными в нашей предшествующей работе [13], посвященной изучению воспламенения аммиака с простыми углеводородами CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 и C_2H_6 . Это побудило нас проанализировать эффект от использования его ядра азотной кинетики в составе $C3Mech$ вместо $NUIG-2023$.

Таким образом, целью настоящей работы являлось экспериментальное измерение времен задержек воспламенения в смесях $NH_3/n-C_7H_{16}$, NH_3/C_6H_{12} и NH_3/C_7H_8 и численное моделирование полученных результатов с использованием универсального механизма $C3Mech4.0.1$ и его вариаций с альтернативной кинетикой аммиака.

2. Экспериментальные методы

Воспламенение исследуемых смесей наблюдалось за отраженными ударными волнами в ударной трубе стандартной конструкции. Камера высокого давления (КВД) имела круглое сечение диаметром 32 мм и длину 2.2 м, камера низкого давления (КНД) — квадратное сечение со стороной 29 мм и длину 2.6 м. Камеры разделялись алюминиевой диафрагмой толщиной 70 мкм, спонтанно разрывавшейся при нагнетании толкающего газа (гелия) в КВД. Труба

была оснащена тремя пьезоэлектрическими датчиками давления *PCB Piezotronics*, расположенными на расстояниях 23, 67 и 369 мм от торца, позволявшими регистрировать прохождение падающей ударной волны (ПУВ). По разности времен прихода фронта ПУВ в соответствующие сечения определялась её скорость, которая вместе с начальным давлением и составом исследуемой смеси использовалась для расчёта параметров газа за отраженной ударной волной (ОУВ). Для расчетов использовался программный пакет *SDToolBox* [14]. Необходимые для расчетов термодинамические свойства газовых соединений брались из общедоступной базы [15]. Оборудованное оптическими окнами исследуемое сечение располагалось на расстоянии 23 мм от торца. Воспламенение наблюдалось посредством регистрации излучения возбужденного радикала OH^* , являющегося характеристическим для воспламенения как углеводородных соединений [16], так и аммиака [17]. Излучение в полосе 308 нм, соответствующее переходу $\text{A}^2\Sigma^+ \rightarrow \text{X}^2\Pi$, регистрировалось с помощью фотоэлектронного умножителя *Hamamatsu H6780-04*, оснащенного интерференционным фильтром с полосой пропускания 313 ± 25 нм. Временное разрешение эмиссионных измерений определялось скоростью отраженной ударной волны и шириной используемых в оптической схеме щелевых диафрагм и составляло около 5 мкс.

Все эксперименты проводились в разбавленных аргоном стехиометрических смесях, содержащих 7 % мольной доли кислорода O_2 . Исследуемыми добавками толуола, циклогексана и н-гептана замещалось 10 % или 30 % содержащегося в смеси аммиака, при этом сохранялась её стехиометричность. Смеси составлялись манометрическим методом и выдерживались в смесевом баллоне не менее 12 часов перед проведением экспериментов для достижения полного перемешивания. В таблице 1 приведены составы исследуемых смесей, их условные обозначения, используемые далее в статье, и параметры соответствующих серий экспериментов. В силу технологических особенностей ударнотрубного эксперимента давление за отраженной ударной волной испытывает случайные колебания от эксперимента к эксперименту, а также уменьшается при уменьшении начального давления (при постоянной толщине диафрагмы) для увеличения скорости ударной волны и температуры за ОУВ. При моделировании использовались медианные значения давления в экспериментальной серии, также указанные в табл. 1.

Таблица 1

Исследованные смеси

Смесь	Мольные доли, %						$P_{\text{ОУВ}}$, бар	$P_{\text{мед}}$, бар	$T_{\text{ОУВ}}$, К
	NH_3	Толуол	Циклогексан	н-гептан	O_2	Ar			
АММ	9.333	0	0	0	7	83.667	$5.9 \div 6.8$	6.4	$1450 \div 1840$
ТОЛ100	0	0.778	0	0	7	92.222	$6.8 \div 7.6$	7.2	$1305 \div 1525$
ЦГКС100	0	0	0.778	0	7	92.222	$6.9 \div 8.0$	7.6	$1210 \div 1365$
ГЕПТ100	0	0	0	0.636	7	92.364	$7.4 \div 8.3$	7.9	$1215 \div 1375$
ТОЛ10	8.4	0.078	0	0	7	84.522	$6.1 \div 6.8$	6.6	$1465 \div 1660$
ЦГКС10	8.4	0	0.078	0	7	84.522	$6.3 \div 7.1$	6.7	$1435 \div 1615$
ГЕПТ10	8.4	0	0	0.064	7	84.536	$6.6 \div 7.2$	7.0	$1435 \div 1650$
ТОЛ30	6.533	0.233	0	0	7	86.234	$6.5 \div 7.2$	6.9	$1405 \div 1605$
ЦГКС30	6.533	0	0.233	0	7	86.234	$6.6 \div 7.4$	7.0	$1365 \div 1545$
ГЕПТ30	6.533	0	0	0.191	7	86.276	$6.9 \div 7.6$	7.2	$1340 \div 1510$

Аммиак обладает значительной способностью к адсорбции на металлические поверхности [18], что при напуске исследуемой смеси в УТ через коммуникации из нержавеющей стали может приводить к обеднению топливной смеси в исследуемом сечении УТ и

соответствующему изменению времени задержки воспламенения. Для минимизации этого эффекта перед началом экспериментальной серии производилось предварительное наполнение УТ и соединительных коммуникаций исследуемой смесью и выдерживание её в течение 5 минут для пассивации поверхностей. Как показал анализ воспроизводимости результатов экспериментов, заметная депассивация происходила лишь при достаточно длительном (несколько часов) контакте поверхностей с содержащим пары воды атмосферным воздухом, а варьирование времени откачки трубы влияния на время задержки воспламенения не оказывало. По-видимому, над процессами физической адсорбции, обусловленными силами Ван-дер-Ваальса, преобладала хемосорбция аммиака, при которой образуется сравнительно прочный химический связанный поверхностный комплекс Fe-NH_3 [18].

Примеры полученных в эксперименте временных профилей давления и излучения OH^* представлены на рис. 1. Как уже отмечалось в наших предшествующих работах [12, 19], в условиях ударно-трубного эксперимента при воспламенении аммиака (рис. 1, а) как пик излучения OH^* , так и сопровождающий его скачок давления имеют значительно более пологую форму по сравнению с аналогичными экспериментами в углеводородах (рис. 1, б). Это увеличивает случайный разброс измеряемого времени задержки воспламенения и делает его регистрируемое значение в определенной степени зависящим от используемой методики измерений, в связи с чем особое внимание уделялось её единообразию. За момент воспламенения принималось пересечение с нулевым уровнем касательной, проведенной в точке максимального наклона профиля излучения (см. рис. 1). Погрешность измерения в отдельно взятом эксперименте не превосходила 15 мкс.

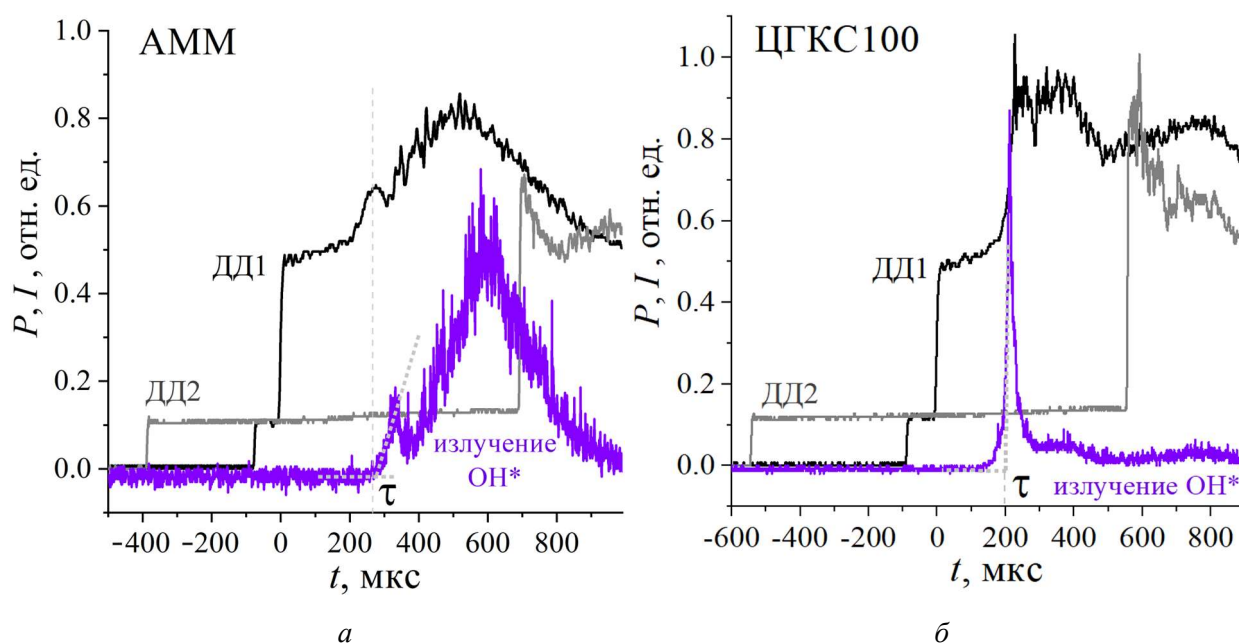


Рис. 1. Примеры профилей давления на датчиках ДД1 (расстояние 23 мм от торца УТ) и ДД2 (369 мм) и излучения радикалов OH^* , полученных в экспериментах (а) в смеси АММ при $T = 1630 \text{ K}$, $P = 6.2 \text{ бар}$ и (б) в смеси ЦГКС100 при $T = 1320 \text{ K}$, $P = 7.3 \text{ бар}$

3. Расчетные методы

Расчеты проводились в программном пакете *Cantera* [20] в приближении реактора постоянного объема, хорошо зарекомендовавшего себя для моделирования процессов воспламенения за ударными волнами, сопровождающихся значительным увеличением давления при быстром энерговыделении [21]. Основным используемым кинетическим механизмом являлся *S3Mech4.0.1* [6,7], обладающий исключительной на данный момент универсальностью и валидированный разработчиками на экспериментальных данных по воспламенению всех

рассмотренных присадок — толуола, циклогексана и различных тяжелых алканов, в том числе н-гептана — в условиях ударных труб и машин быстрого сжатия. Для свободного использования предлагается несколько различных сборок механизма различного размера и вычислительной сложности [8], покрывающих различные наборы соединений и температурных диапазонов и имеющих свои условные обозначения. В настоящей работе использовалась сборка 3XQ9, обеспечивавшая моделирование всех исследованных смесей в условиях высокотемпературного пиролиза и окисления за ударными волнами.

Наряду с этим были также выполнены расчеты с использованием механизма KAUST [12], обеспечившего наилучшее описание экспериментальных результатов в нашей предшествующей работе [13] и механизма *Konnov2019* [22], также проявившего себя достаточно хорошо, а также более современного механизма той же группы *Konnov2025* [23], при создании которого была значительно переработана базовая кинетика аммиака. Основные характеристики и условные обозначения рассмотренных механизмов приведены в таблице 2.

Результатом расчета являлись временные профили концентраций компонентов смеси. Многие из представленных в литературе механизмов окисления аммиака вообще не включают в себя кинетику образования и тушения возбужденного радикала OH^* , а ряд других, к которым относится и C3Mech4.0.1, не рассматривают специфичные для аммиачных смесей реакции его формирования, такие как $\text{N}_2\text{O} + \text{H} \leftrightarrow \text{N}_2 + \text{OH}^*$ [17]. В связи с этим для определения времени задержки воспламенения использовался временной профиль концентрации его основного состояния OH (как было продемонстрировано в [13], разница в определяемом из расчета времени задержки воспламенения при этом не превышает нескольких микросекунд, что не влияет сколь-либо значимо на характер расчетных температурных зависимостей). Как и при обработке экспериментальных сигналов, за момент воспламенения принималась точка пересечения касательной к профилю концентрации в точке максимальной производной с нулевым уровнем.

Таблица 2

Использованные кинетические механизмы

Обозначение	Кол-во соединений	Кол-во реакций	Источник
<i>C3Mech</i>	1274	9513	[6–8]
в т.ч. кинетика соединений азота	103	1004	[10]
<i>KAUST</i>	152	1388	[12]
в т.ч. кинетика соединений азота	85	824	
<i>Konnov2019</i>	128	957	[22]
<i>Konnov2025</i>	527	6294	[23]
<i>C3/KAU</i>	1275	9333	данная работа

4. Результаты и обсуждение

На рисунке 2 представлены экспериментальные значения времен задержки воспламенения в смеси АММ и расчетные температурные зависимости, полученные с использованием различных моделей. Можно видеть, что в рамках использованного в настоящей работе подхода наилучшее согласие с экспериментом обеспечивает модель *KAUST*. Более новая модель группы Коннова с соавторами *Konnov2025* [23], продемонстрировала несколько худшее описание экспериментальных данных по сравнению с предшествующей моделью *Konnov2019* [22] в области низких температур, и обе модели были исключены из дальнейшего рассмотрения.

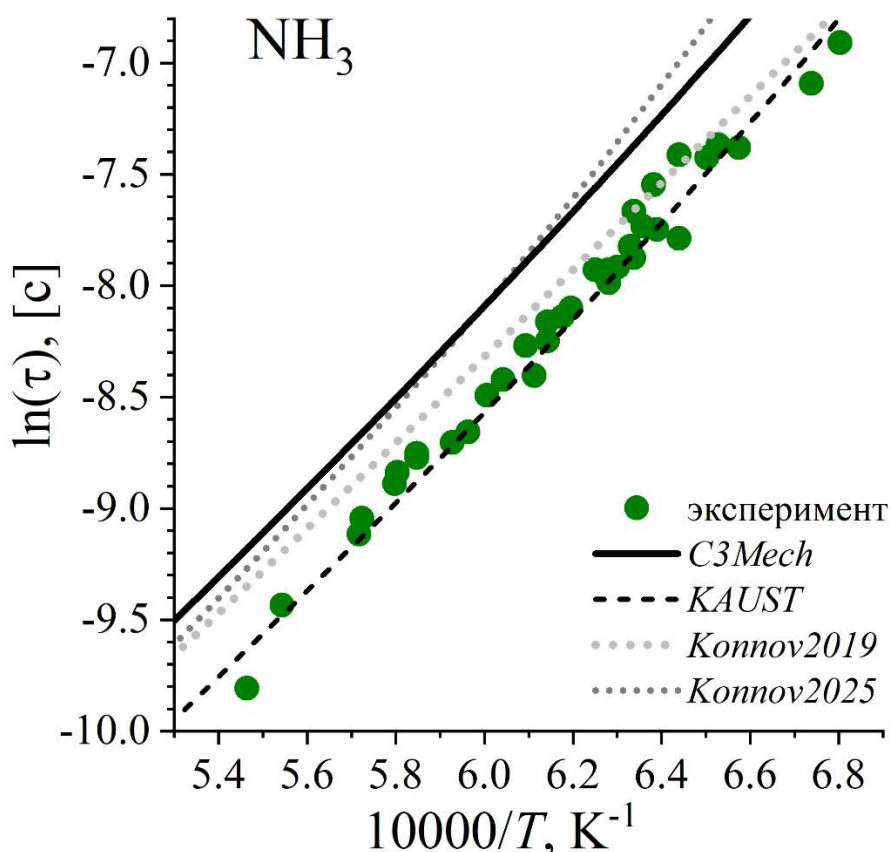


Рис. 2. Экспериментальные (символы) и расчетные (линии) времена задержки воспламенения в смеси АММ

Наряду с оригинальной версией механизма *C3Mech*4.0.1 нами была использована его вариация *C3/KAU*, в которой блок реакций с участием азотных соединений был заменен на соответствующий блок из механизма *KAUST*. Контрольные расчеты показали, что разница значений времен задержки воспламенения аммиака, предсказываемых моделями *C3Mech* и *C3/KAU* (обусловленная различными значениями констант скорости реакций водородных соединений), не превосходит несколько микросекунд, и для чистого аммиака *C3/KAU* полностью сохраняет предсказательную силу *KAUST*.

На рисунках 3–5 представлены экспериментальные значения времен задержки воспламенения, измеренные в чистых углеводородных топливах (смеси ГЕПТ100, ЦГКС100, ТОЛ100) и аммиачных смесях с их добавками, и расчётные температурные зависимости, полученные с помощью механизмов *C3Mech* и *C3/KAU*. Обращает на себя внимание то, что для н-гептана и циклогексана наблюдается весьма хорошее согласие эксперимента и расчёта как для чистых топлив, так и для аммиачных смесей, причем предсказываемые *C3Mech* и *C3/KAU* значения времени задержки воспламенения смесей ГЕПТ10, ГЕПТ30, ЦГКС10 и ЦГКС30 различаются минимально. В противоположность этому, для смесей с добавкой толуола ТОЛ10 и ТОЛ30 наблюдается завышение предсказываемой задержки воспламенения, а переход к модели *C3/KAU* заметно сокращает время задержки воспламенения смеси ТОЛ10, но в то же время практически не влияет на расчетные значения для ТОЛ30 (рис. 5).

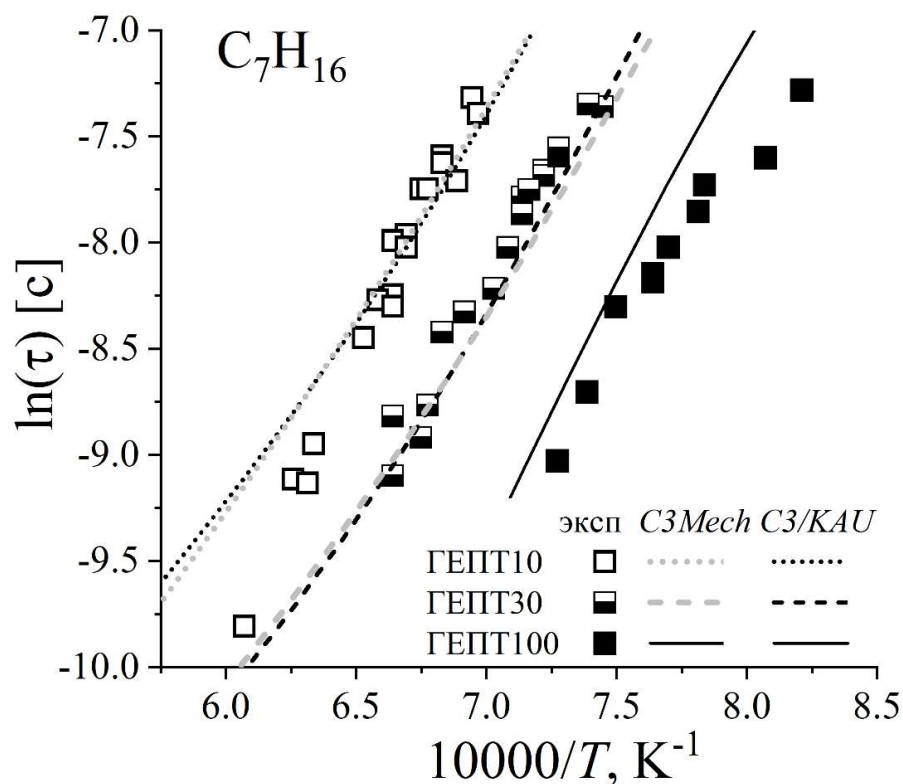


Рис. 3. Экспериментальные (символы) и расчетные (линии) времена задержки воспламенения в содержащих н-гептан смесях ГЕПТ10, ГЕПТ30, ГЕПТ100

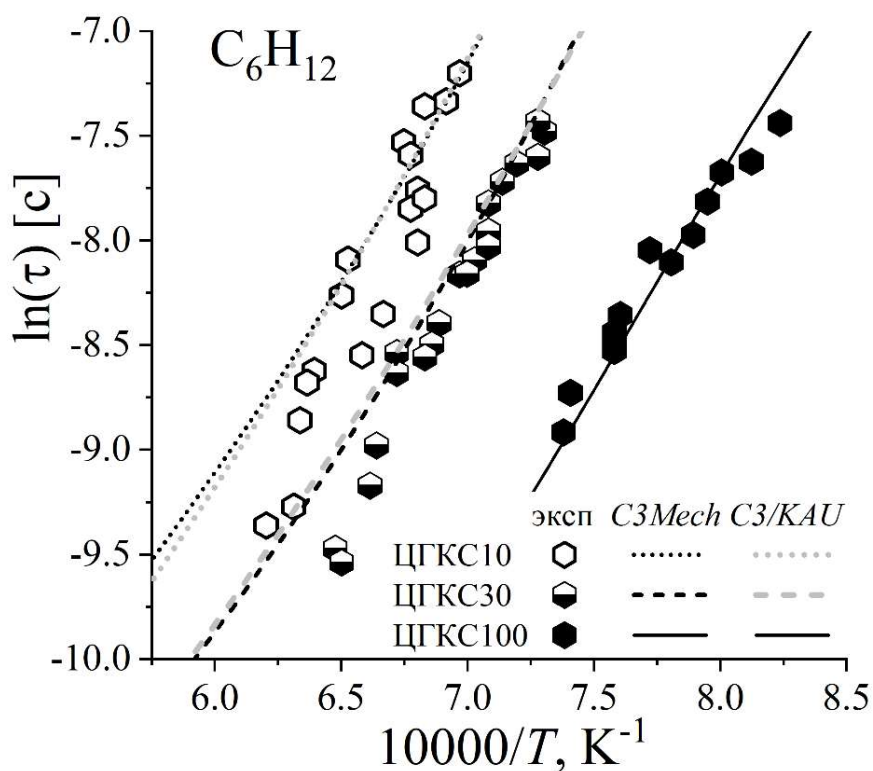


Рис. 4. Экспериментальные (символы) и расчетные (линии) времена задержки воспламенения в содержащих циклогексан смесях ЦГКС10, ЦГКС30, ЦГКС100

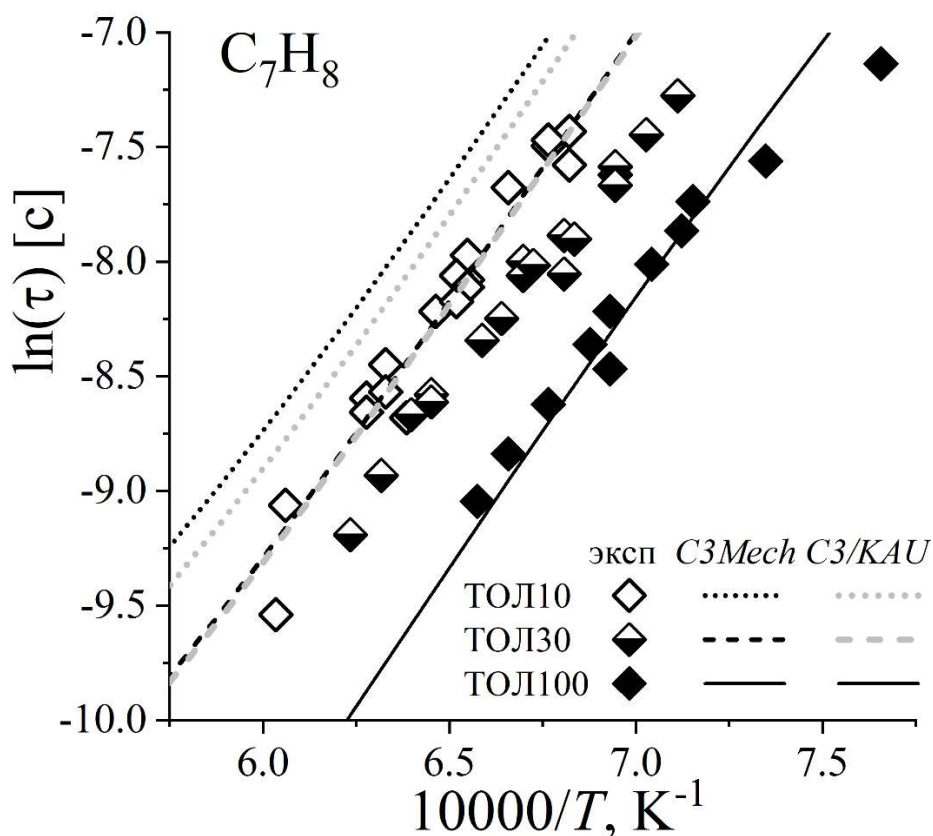


Рис. 5. Экспериментальные (символы) и расчетные (линии) времена задержки воспламенения в содержащих толуол смесях ТОЛ10, ТОЛ30, ТОЛ100

Таким образом, из исследованных в настоящей работе добавок лишь для толуола наблюдается отмеченное нами ранее в работах [13] и [19] завышение предсказываемых времен задержки воспламенения смесей аммиака и углеводородных соединений при корректном описании их воспламенения по отдельности. В работах [13, 19] в качестве возможной причин этого явления называлась неопределенность констант скоростей ряда межрадикальных реакций (прежде всего $\text{NH}_2 + \text{HO}_2 \leftrightarrow \text{NH}_3 + \text{O}_2$), для которых наблюдается высокая чувствительность величин задержки воспламенения к их значению. В случае н-гептана и циклогексана нечувствительность предсказываемого времени задержки к выбору подмеханизма окисления аммиака указывает на то, что наполнение пула радикалов на протяжении времени индукции практически полностью определяется кинетикой пиролиза и окисления углеродсодержащей добавки как при 10 %-, так и при 30 %-ном замещении аммиака. Даже для менее реакционноспособного толуола, воспламенение смесей с которым наблюдалось при более высоких температурах, заметное различие в предсказаниях *C3Mech* и *C3/KAU* наблюдается лишь для смеси ТОЛ10. Вероятно, причиной завышения времен задержки в смесях ТОЛ10 и ТОЛ30 может являться несовершенство кинетической модели пиролиза толуола как такового — при валидации соответствующего подмеханизма *C3Mech4.0.1* на экспериментальных данных, полученных в ударных трубах при давлениях 40 ÷ 50 бар [24, 25] расхождения с экспериментальными данными по масштабу величины были сопоставимы с наблюдавшимися в настоящей работе.

5. Заключение

В работе измерены времена задержек воспламенения смесей аммиака с компонентами модельных топлив: н-гептаном C_7H_{16} , циклогексаном C_6H_{12} и толуолом C_7H_8 за ударными волнами. Сопоставление полученных данных с результатами численного моделирования продемонстрировало, что современный универсальный кинетический механизм *C3Mech4.0.1*

[6–8] обеспечивает хорошее описание воспламенения исследованных смесей аммиака с реакционноспособными тяжелыми углеводородами.

Предложенная модификация механизма C3Mech4.0.1 с использованием блока азотной кинетики из механизма *KAUST* [12] позволила улучшить описание воспламенения чистого аммиака в условиях ударной трубы с сохранением предсказательной силы для его смесей с исследованными добавками.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24–19–00165, <https://rscf.ru/en/project/24-19-00165>) в рамках проведения работ по договору подряда №2026–077 от 26 марта 2026 г.

Литература

1. Valera-Medina A., Amer-Hatem F., Azad A., Dedoussi I., Joannon M., Fernandes R., Glarborg P., Hashemi H., He X., Mashruk S., McGowan J., Mounaim-Rouselle C., Ortiz-Prado A., Ortiz-Valera A., Rossetti I., Shu B., Yehia M., Xiao H., Costa M. Review on Ammonia as a Potential Fuel: From Synthesis to Economics // *Energy Fuels*. 2021. Vol. 35. Pp. 6964–7029 <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c03685>
2. Elbaz A.M., Wang S., Guiberti T.F., Roberts W.L. Review on the recent advances on ammonia combustion from the fundamentals to the applications // *Fuel Commun.* 2022. Vol. 10 Art. 100053. <https://doi.org/10.1016/j.jfueco.2022.100053>
3. Potential of ammonia as fuel in shipping. European Maritime Safety Agency, Lisbon, 2023. <https://www.emsa.europa.eu/newsroom/latest-news/download/7620/4833/23.html>
4. Low-Emission Ammonia Data (LEAD): Vessels. Executive Summary. June 2026. Ammonia Energy Association. <https://ammoniaenergy.org/wp-content/uploads/2026/06/AEA-LEAD-Vessels-Executive-Summary-June-2026.pdf>
5. Albahri T.A. Structural Group Contribution Method for Predicting the Octane Number of Pure Hydrocarbon Liquids // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2003. Vol. 42. Pp. 657–662. <https://doi.org/10.1021/ie020306+>
6. Maffei L.P., Langer R., Murakami Y., Wagnon S.W., Wang P., Liu J., Raza M., Zhu Y., Girhe S., Schwenzer C., Beeckmann J., Klippenstein S.J., Faravelli T., Pitsch H., Senecal P.K., Curran H.J., Modeling combustion chemistry using C3MechV4.0: An extension to mixtures of hydrogen, ammonia, alkanes, and cycloalkanes // *Applications in Energy and Combustion Science*. 2025. Vol. 24. Art. 100385. <https://doi.org/10.1016/j.jaecs.2025.100385>
7. Maffei L.P., Langer R., Murakami Y., Wagnon S.W., Wang P., Liu J., Raza M., Zhu Y., Girhe S., Schwenzer C., Beeckmann J., Klippenstein S.J., Faravelli T., Pitsch H., Senecal P.K., Curran H.J. Corrigendum to “Modeling Combustion Chemistry using C3MechV4.0: An extension to mixtures of hydrogen, ammonia, alkanes, and cycloalkanes” [*Appl. Energy Combust. Sci.* 24 (2025) 100385] // *Applications in Energy and Combustion Science*. 2026. Vol. 26. Art 100462. <https://doi.org/10.1016/j.jaecs.2026.100462>
8. Official C3Mech repository <https://github.com/C3Mech/C3Mech>
9. Szanthoffer A.G., Papp M., Nagy T., Turányi T. Assessing the performance of recent detailed NH₃ and NH₃/H₂ combustion mechanisms // *Combust. Flame*. 2026. Vol. 287. Art. 114878. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2026.114878>
10. Zhu Y, Curran H.J., Girhe S, Murakami Y, Pitsch H., Senecal K., Yang L., Zhou C.W. The combustion chemistry of ammonia and ammonia/hydrogen mixtures: A comprehensive chemical kinetic modeling study // *Combust Flame*. 2024. Vol. 260. Art. 113239. <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.113239>

11. Girhe S., Snackers A., Lehmann T., Langer R., Loffredo F., Glaznev R., Beeckmann J., Pitsch H. Ammonia and ammonia/hydrogen combustion: Comprehensive quantitative assessment of kinetic models and examination of critical parameters // *Combust. Flame*. 2024. Vol. 267. Art. 113560. <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113560>
12. Zhang X., Yalamanchi K.K., Sarathy S.M. Combustion chemistry of ammonia/C1 fuels: A comprehensive kinetic modeling study // *Fuel*. 2023. Vol. 341. Art. 127676. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127676>
13. Drakon A.V., Eremin A.V. Experimental and Numerical Investigation of Ignition of Ammonia–Hydrocarbon Mixtures in Shock Tube Conditions // *Kinet. Catal.* 2025. Vol. 66. Pp. 606–617. <https://doi.org/10.1134/S002315842560052X>
14. Browne S., Ziegler J., Bitter N., Schmidt B., Lawson J., Shepherd J. SDToolbox—Numerical Tools for Shock and Detonation Wave Modeling // *Explosion Dynamics Laboratory GALCIT. Technical Report*. 2018. <https://shepherd.caltech.edu/EDL/PublicResources/sdt/doc/ShockDetonation/ShockDetonation.pdf>
15. Burcat A., Ruscic B. Third millenium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables // *Report ANL-05/20 Argonne, Illinois: Chemistry Division, Argonne National Laboratory*, 2005.
16. Loukhovitski B.I., Sharipov A.S. A detailed kinetic submechanism for OH* chemiluminescence in hydrocarbon combustion // *Combust. Flame*. 2025. V. 272. Art. 113865. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113865>
17. Capriolo G., Issayev G., Zhu X., Vargas J., Guiberti T.F. An experimental and kinetic study of OH(A²Σ⁺) formation and quenching in ammonia-hydrogen-air flames // *Combust. Flame*. 2024. Vol. 260. Art. 113258. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.113258>
18. Bystrov N., Emelianov A., Kurbatova E., Yatsenko P. An experimental study of high-temperature pyrolysis of NH₃ under strong Ar dilution // *Combust. Flame*. 2026. Vol. 290. Art. 115051. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2026.115051>
19. Дракон А.В., Ерёмин А.В., Колотушкин Р.Н., Коршунова М.Р., Михеева Е.Ю., Ходыко Е.С. О роли реакций с участием радикала NH₂ в кинетике воспламенения аммиак-эфирных смесей // *Вестник ОИВТ РАН*. 2025. Т.20. С.31–38. https://vestnik.jiht.ru/articles/article_meta.php?id=1034
20. Goodwin, D.G., Moffat, H.K., Schoegl, I., Speth, R.L., and Weber, B.W., Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes, 2024, Vol.3.1.0. <https://doi.org/10.5281/zenodo.14455267>
21. Chaos M., Dryer F.L. Chemical-kinetic modeling of ignition delay: Considerations in interpreting shock tube data // *Int. J. Chem. Kinet.* 2010. Vol. 42. Pp. 143–150. <https://doi.org/10.1002/kin.20471>
22. Li R., Konnov A.A., He G., Qin F., Zhang D. Chemical mechanism development and reduction for combustion of NH₃/H₂/CH₄ mixtures // *Fuel*. 2019. Vol. 257. Art. 116059. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116059>
23. Xie J., Song J., Konnov A.A., Su B., Wang T., Sun K. Effects of detailed kinetics and thermodynamics of DEE+NH₂ reactions on the ignition of ammonia blended with DEE // *Combust. Flame*. 2025. V. 274. Art. 113966. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2025.113966>
24. Shen H.P.S., Oehlschlaeger M.A. The autoignition of C₈H₁₀ aromatics at moderate temperatures and elevated pressures // *Combust. Flame*. 2009. Vol. 156. Pp. 1053–1062. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.11.015>
25. Zhang Y., Somers K.P., Mehl M., Pitz W.J., Cracknell R.F., Curran H.J. Probing the antagonistic effect of toluene as a component in surrogate fuel models at low temperatures and high pressures. a case study of toluene/dimethyl ether mixtures // *Proc. Combust. Inst.* 2017. Vol. 36. Pp. 413–421. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.190>

References

1. Valera-Medina A., Amer-Hatem F., Azad A., Dedoussi I., Joannon M., Fernandes R., Glarborg P., Hashemi H., He X., Mashruk S., McGowan J., Mounaim-Rouselle C., Ortiz-Prado A., Ortiz-Valera A., Rossetti I., Shu B., *Energy Fuels*, 2021, vol. 35, pp. 6964–7029. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c03685>
2. Elbaz A.M., Wang S., Guiberti T.F., Roberts W.L., *Fuel Commun.*, 2022, vol. 10, ID 100053. <https://doi.org/10.1016/j.jfueco.2022.100053>
3. Potential of ammonia as fuel in shipping. European Maritime Safety Agency, Lisbon, 2023. <https://www.emsa.europa.eu/newsroom/latest-news/download/7620/4833/23.html>
4. Low-Emission Ammonia Data (LEAD): Vessels. Executive Summary. June 2026. Ammonia Energy Association. <https://ammoniaenergy.org/wp-content/uploads/2026/06/AEA-LEAD-Vessels-Executive-Summary-June-2026.pdf>
5. Albahri T.A., *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2003, vol. 42, pp. 657–662. <https://doi.org/10.1021/ie020306+>
6. Maffei L.P., Langer R., Murakami Y., Wagnon S.W., Wang P., Liu J., Raza M., Zhu Y., Girhe S., Schwenzer C., Beeckmann J., Klippenstein S.J., Faravelli T., Pitsch H., Senecal P.K., Curran H.J. *Appl. Energy Combust. Sci.*, 2025, vol. 24, ID 100385. <https://doi.org/10.1016/j.jaecs.2025.100385>
7. Maffei L.P., Langer R., Murakami Y., Wagnon S.W., Wang P., Liu J., Raza M., Zhu Y., Girhe S., Schwenzer C., Beeckmann J., Klippenstein S.J., Faravelli T., Pitsch H., Senecal P.K., Curran H.J. *Appl. Energy Combust. Sci.*, 2026, vol. 26, ID 100462. <https://doi.org/10.1016/j.jaecs.2026.100462>
8. Official C3Mech repository <https://github.com/C3Mech/C3Mech>
9. Szanthoffer A.G., Papp M., Nagy T., Turányi T., *Combust. Flame*, 2026, vol. 287, ID 114878. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2026.114878>
10. Zhu Y, Curran HJ, Girhe S, Murakami Y, Pitsch H, Senecal K, Yang L, Zhou CW., *Combust Flame.*, 2024, vol. 260, ID 113239. <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.113239>
11. Girhe S., Snackers A., Lehmann T., Langer R., Loffredo F., Glaznev R., Beeckmann J., Pitsch H. *Combust Flame*, 2024, vol. 267, ID 113560. <https://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113560>
12. Zhang X., Yalamanchi K.K., Sarathy S.M., *Fuel*, 2023, vol. 341, ID 127676. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127676>
13. Drakon A.V., Eremin A.V. *Kinet. Catal.*, 2025, vol. 66, pp. 606–617. <https://doi.org/10.1134/S002315842560052X>
14. Browne S., Ziegler J., Bitter N., Schmidt B., Lawson J., Shepherd J., *SDToolbox—Numerical Tools for Shock and Detonation Wave Modeling*, Explosion Dynamics Laboratory GALCIT. Technical Report. 2018. URL: <https://shepherd.caltech.edu/EDL/PublicResources/sdt/doc/ShockDetonation/ShockDetonation.pdf>
15. Burcat A., Ruscic B. *Third millenium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with updates from active thermochemical tables*, Report ANL-05/20 Argonne, Illinois: Chemistry Division, Argonne National Laboratory, 2005.
16. Loukhovitski B.I., Sharipov A.S., *Combust. Flame*, 2025, vol. 272, ID 113865. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113865>
17. Capriolo G., Issayev G., Zhu X., Vargas J., Guiberti T.F., *Combust. Flame*, 2024, vol. 260, ID 113258. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2023.113258>
18. Bystrov N., Emelianov A., Kurbatova E., Yatsenko P., *Combust. Flame*, 2026, vol. 290, ID 115051. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2026.115051>
19. Drakon A.V., Eremin A.V., Kolotushkin R.N. Korshunova M.R. Mikheyeva E.Yu., Khodyko E.S., *Vestnik OIVT*, vol. 20, pp. 31–38 [in Russian]. https://vestnik.jiht.ru/articles/article_meta.php?id=1034
20. Goodwin, D.G., Moffat, H.K., Schoegl, I., Speth, R.L., and Weber, B.W., Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes, 2024, vol. 3.1.0. <https://doi.org/10.5281/zenodo.14455267>

21. Chaos M., Dryer F.L., *Int. J. Chem. Kinet.*, 2010, vol. 42, pp. 143–150.
<https://doi.org/10.1002/kin.20471>
22. Li R., Konnov A.A., He G., Qin F., Zhang D., *Fuel*, 2019, vol. 257, ID 116059.
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116059>
23. Xie J., Song J., Konnov A.A., Su B., Wang T., Sun K., *Combust. Flame*, 2025, vol. 274, ID 113966.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2025.113966>
24. Shen H.P.S., Oehlschlaeger M.A., *Combust. Flame*, 2009, vol. 156, pp. 1053–1062.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.11.015>
25. Zhang Y., Somers K.P., Mehl M., Pitz W.J., Cracknell R.F., Curran H.J., *Proc. Combust. Inst.*, 2017, vol. 36, pp. 413–421. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.190>

Статья поступила в редакцию 29 июля 2026 г.