

## ОБРАЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО ВОЗБУЖДЕННОГО РАДИКАЛА $\text{OH}^*(A)$ В РЕАКЦИИ ВОДОРОДА С КИСЛОРОДОМ ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ В НЕРАВНОВЕСНЫХ УСЛОВИЯХ.

О.В. Скребков, А.Л. Смирнов  
Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

Механизм образования электронно возбужденного радикала  $\text{OH}^*(A^2\Sigma^+)$  исследуется путем анализа результатов расчетов, количественно описывающих ударно-волновые эксперименты по определению момента максимального излучения  $\text{OH}^*$  при температурах  $T < 1500$  К и давлениях  $p \leq 2$  атм, когда колебательная неравновесность является фактором, определяющим механизм и скорость процесса в целом. Эти расчеты выполнялись путем моделирования процесса окисления водорода с учетом колебательной неравновесности исходных компонентов,  $\text{H}_2$  и  $\text{O}_2$ , интермедиатов,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{OH}(X^2\Pi)$ ,  $\text{O}_2^*(^1\Delta)$ , и продукта реакции  $\text{H}_2\text{O}$ .

Анализ показал, что в этих условиях важными (по относительному вкладу в суммарный процесс образования  $\text{OH}^*$ ) являются реакции  $\text{OH}(v) + \text{Ar} \rightarrow \text{OH}^* + \text{Ar}$ ,  $\text{O}^*(^1D) + \text{H}_2(v) \rightarrow \text{OH}^* + \text{H}$ ,  $\text{O} + \text{HO}_2(v) \rightarrow \text{OH}^* + \text{O}_2$  и (на начальной стадии процесса) реакция  $\text{H}_2 + \text{HO}_2(v) \rightarrow \text{OH}^* + \text{H}_2\text{O}$ , протекающие в колебательно неравновесном режиме, когда активационный барьер преодолевается в результате зависимости констант скорости от степени колебательного возбуждения реагентов; а также бимолекулярные реакции  $\text{O}_3 + \text{H} \rightarrow \text{OH}^* + \text{O}_2$ ,  $\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{OH}^* + \text{H}_2\text{O}$  (на стадии интенсивной реакции при формировании максимума излучения) как реакции обратные процессам химического тушения.