

ИНГИБИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ ВОДОРОДА С КИСЛОРОДОМ
ЗА ФРОНТОМ ПАДАЮЩЕЙ УДАРНОЙ ВОЛНЫ
ДОБАВКАМИ МНОГОАТОМНЫХ ГАЗОВ

Скребков О.В.

Институт проблем химической физики РАН

Ингибирующее влияние добавок многоатомных газов исследуется путем численного моделирования процесса окисления водорода с учетом колебательной неравновесности исходных компонентов, интермедиатов и продуктов реакции за ударной волной в рамках колебательно неравновесной модели, центральным элементом которой является последовательный учет колебательной неравновесности радикала HO_2 как важнейшего промежуточного продукта в процессе цепного разветвления.

Показано, что эффект ингибирования реакции водорода с кислородом добавками различных многоатомных газов можно объяснить их влиянием на скорость колебательной релаксации радикала HO_2 , образующегося в ходе реакции в колебательно возбужденном состоянии. В качестве конкретных примеров таких добавок рассмотрены метан, тетрафторметан, фторметил, дифторметан, хлорфторметан, формальдегид, этан, гексафторэтан, этилен, тетрафторэтилен и пропан. Выбор данных конкретных веществ из числа известных как ингибиторы, вообще говоря, произволен.