



Рис. 2. Зависимость температуры зажигания от соотношения шихт с различной калорийностью.

где  $T_n$  — начальная температура;  $c$  — удельная теплоемкость шихты;  $z$  — предэкспонент;  $Q$  — тепловой эффект реакции;  $E$  — энергия активации;  $K$  — темп нагрева;  $R$  — газовая постоянная. Причем

$$T(x; 0) = T_n \quad (0 < x < \infty), \quad T(0; t) = T_n + Kt, \quad \frac{\partial T}{\partial x}(\infty, t) = 0.$$

Воспользоваться моделью полубесконечного тела позволяет тот факт, что в течение всего периода зажигания температура холодного конца шихты меняется незначительно.

Для состава  $Cr_2O_3 + Al + C$  ( $Q = 646$  кал/г,  $E = 44,5$  ккал/моль,  $c = 0,06$  кал/(г·град),  $z = 3,3 \cdot 10^4$  1/с) расчет дает  $T_* = 1144^\circ C$ , а для состава  $FeO + Al$  ( $Q = 775$  кал/г,  $E = 43,4$  ккал/моль,  $c = 0,11$  кал/(г·град),  $z = 3,9 \cdot 10^7$  1/с)  $T_* = 955^\circ C$ .

Из сопоставления расчетных и экспериментальных величин следует, что данный режим зажигания описывается моделью зажигания плоской поверхностью полубесконечного слоя шихты. Тем самым подтверждается возможность использования приведенной выше формулы для оценок температуры зажигания высококалорийных СВС-шихт данного класса. Результаты экспериментов также показывают, что для зажигания можно использовать нихромовые спирали и другие материалы, обеспечивающие температуру в интервале  $900-1200^\circ C$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Вилунов В. Н. Теория зажигания конденсированных веществ. — Новосибирск: Наука, 1984. — С. 125—128.

г. Черноголовка

Поступила в редакцию 24/1 1992,  
после доработки — 24/VII 1992

УДК 541.127

В. И. Бабушок, А. Н. Дакданча

### ГЛОБАЛЬНЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ДЛЯ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ГАЗОФАЗНЫХ РЕАКЦИЙ

Описаны основные типы кинетических моделей химических реакций, используемых при исследовании процессов горения. Обсуждается ограниченность применения глобальных кинетических параметров. Представлена подборка глобальных параметров высокотемпературных газофазных химических реакций.

Несмотря на быстрый рост вычислительных возможностей и появление детальных кинетических моделей для описания горения ряда углеводородов, использование небольших кинетических схем, способных адекватно описать основные характеристики процессов горения, имеет большую важность [1—4]. Преимущество глобальных (эффективных, макрокинетических, суммарных, брутто) моделей — их простота. Детальные

© В. И. Бабушок, А. Н. Дакданча, 1993.

кинетические схемы применяются при изучении ламинарных пламен углеводородов. Однако их использование для расчетов, например сложных газодинамических течений, затруднено. Глобальный и квазиглобальный подходы к описанию кинетики химических реакций горения дают альтернативу детальному подходу. Для многих реакционных систем отсутствуют надежные детальные схемы, и разработка глобальных кинетических моделей, по-видимому, единственный путь их моделирования в настоящее время. Наличие эффективных кинетических параметров позволяет использовать имеющиеся теоретические соотношения для различного вида оценок и анализа процессов горения: периода задержки воспламенения, скорости пламени и др.

**Виды кинетических моделей.** Детальная кинетическая схема, включающая все возможные элементарные стадии между реакционными частицами системы, наиболее полно описывает кинетику химической реакции. В действительности имеется лишь некоторое приближение детального описания, которое строится на основе имеющихся сведений о кинетике процесса. Детальные модели могут включать сотни и тысячи стадий между многими десятками реакционных частиц. Существующие вычислительные возможности и отсутствие кинетических данных для многих процессов существенно ограничивают уровень детализации кинетического механизма. В связи с этим в последние годы активно изучаются различные способы представления кинетики процесса более простыми моделями: упрощенной, обобщенной, скелетной, квазиглобальной, смешанной и глобальной.

Первый уровень сокращения детальных схем — разработка упрощенных (сокращенных) моделей. Для этого широко используются методы расчета коэффициентов чувствительности концентраций реагентов к константам скоростей стадий, анализ скоростей стадий и др. В итоге конструируется кинетическая модель, состоящая из набора важных для исследованной области параметров элементарных стадий. Упрощенные модели обладают, естественно, более лучшими экстраполяционными возможностями по сравнению с глобальными и представляют собой детальные модели, из которых исключены несущественные стадии и реакционные частицы.

При получении более низких уровней описания используется свертка элементарных стадий и реакционных частиц в некоторые обобщенные стадии и частицы. В частности, обобщенная кинетическая схема строится на основе механизма, общего для класса интересующих реакций, например разветвленно-цепных реакций [5]. Примером может служить модель [6], предложенная для кинетического описания воспламенения углеводородных топлив. Другая разновидность — скелетная схема. Она создается на основе графического представления механизма реакции. Для этого используются различного вида схематические диаграммы, показывающие основные пути превращения реагентов в продукты. Глобальная кинетическая модель — наиболее простой способ описания кинетики процесса. Химическая реакция представляется в виде одной брутто-стадии:

исходные вещества  $\rightarrow$  продукты,

а скорость реакции

$$\frac{dc}{dt} = A \exp(-E/RT) \prod c_i^{v_i},$$

где  $A$ ,  $E$ ,  $v_i$  — эффективные предэкспоненциальный множитель, энергия активации и порядок по  $i$ -му компоненту соответственно. Возможны, конечно, и иные формы представления глобальной скорости реакции. Отметим, что одностадийные схемы используются и в теории горения.

Методы теории горения широко применялись для определения эффективных кинетических параметров [7]. В настоящее время в связи с необходимостью использования простых кинетических моделей вновь возник интерес к определению глобальных кинетических параметров. Однако при этом появились новые элементы:

Система	Давление, температура, состав	Тип и характеристика процесса	Кинетические данные	Литература
1	2	3	4	5
O <sub>2</sub> /O <sub>3</sub>	T = 300 К, P = 0,1 ÷ 10 атм, 50 % O <sub>2</sub> , 50 % O <sub>3</sub>	Пламя, мод.	2O <sub>3</sub> → 3O <sub>2</sub> , n = 2, A = 1,12 · 10 <sup>12</sup> [моль, см, с], E = 12,7 ккал/моль, приведены данные о зависимости кинетических параметров от состава, T <sub>0</sub> и p <sub>0</sub>	[17, 18]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	T = 900 ÷ 1350 К, P = 0,23 ÷ 1,96 атм, стех. смесь	УВ, мод.	ln (τ[O <sub>2</sub> ]) = A + (B/T) + c p <sup>n</sup> exp (D/T), A = -10,7 ln (мкс·моль/л), B = = 9130 К ln(мкс·моль/л), n = 2, c = 3 · 10 <sup>-9</sup> (атм) <sup>-2</sup> ln (мкс·моль/л), D = = 19000 К	[19]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	T = 1100 ÷ 2100 К, 2H <sub>2</sub> + 5 (воздух), [H <sub>2</sub> ]/[O <sub>2</sub> ] = 0,0075 ÷ 100	УВ	lg {[H <sub>2</sub> ] [O <sub>2</sub> ] <sup>0,5</sup> τ} = 3100/T - 9, 8, [моль, с, л, К]	[20]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	T = 1100 ÷ 2100 К	УВ	lg ([O <sub>2</sub> ]τ) = -10,467 + (3966/T), [E] = ккал/моль, [c] = моль/л, [τ] = с <sup>-1</sup>	[21]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	T = 1100 ÷ 2200 К, бедные смеси	УВ	lg {[H <sub>2</sub> ] <sup>2/3</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>1/3</sup> τ} = -10,44 + 17200/(4,58 T) [моль, с, л, кал, К]	[22]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	T = 850 ÷ 1110 К, P = 1 атм	Р. пр., адиаб.	-d[H <sub>2</sub> ]/dt = 10 <sup>10,71</sup> exp (-39,5/RT) · [H <sub>2</sub> ], [c] = моль/см <sup>3</sup> , [E] = ккал/моль, [k] = с <sup>-1</sup>	[23]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	T = 1000 ÷ 2000 К, p = 0,1 МПа, Φ = 0,2 ÷ 2,0	Мод.	Рассматривается кинетика тепловыделения. Двухступенчатая глобальная модель: 1) H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> = 2ОН, 2) 2ОН + H <sub>2</sub> = 2H <sub>2</sub> O, k <sub>1</sub> = (8,917Φ + 31,433/Φ - 28,950)10 <sup>47</sup> T <sup>-10</sup> exp (-20368/RT), k <sub>2</sub> = (2,0 + 1,333/Φ - 0,833Φ)10 <sup>04</sup> T <sup>-13</sup> exp (-177947/RT), константы обратных стадий вычислены через K <sub>p</sub> , [k] = см <sup>3</sup> /(моль·с), [E] = = Дж/моль	[8]

H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	—	Гор.	$-d[H_2]/dt = 0,144 \cdot 10^{13} T^{-1,5} \exp(-3430/T) \cdot [H_2]^{1,5} [O_2]$ , [кг/(м <sup>3</sup> ·с)]	[13]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	—	Гор.	$-d[H_2]/dt = 1,14 \cdot 10^{10} \exp(-6860/RT) \cdot [H_2]^{3/2} [O_2]$ , [с] = моль/л	[14, 24]
H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	$T > 4000$ К, $p = 0,2 \div 5$ атм	Гор.	$\tau = 8 \cdot 10^{-9} p^{-1} \exp(9600/T)$ , [p] = атм	[14]
H <sub>2</sub> /(NO + O <sub>2</sub> )	$T = 850 \div 1110$ К, $p = 1$ атм	Р. пр., адиаб.	$-d[H_2]/dt = 10^{16,71} \exp(-68,6/RT) \cdot [H_2]$ , [с] = моль/см <sup>3</sup> , [E] = ккал/моль, [k] = с <sup>-1</sup>	[23]
H <sub>2</sub> /NO <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	$T = 850 \div 1110$ К, $p = 1$ атм	Р. пр., адиаб.	$-d[H_2]/dt = 10^{14,26} \exp(-46,2/RT) \{ [H_2]^{1,4} [NO_2] / ([NO_2] + [NO]) \}$ , [k] = = (см) <sup>1,2</sup> моль <sup>-0,4</sup> ·с <sup>-1</sup> , [E] = ккал/моль	[23]
H <sub>2</sub> /воздух	—	Пламя диф.	$-d[H_2O]/dt = 2,96 \cdot 10^{11} \exp(-6900/T) \cdot [H_2] [O_2]^{0,92}$ , [с] = моль/см <sup>3</sup>	[25]
H <sub>2</sub> /воздух	—	Пламя, U <sub>n</sub>	$-d[H_2]/dt = 2,14 \cdot 10^{14} \exp(-129000/RT) \cdot [H_2]$ , [E] = кДж/кмоль, [k] = = с <sup>-1</sup> , [с] = моль/см <sup>3</sup>	[26]
H <sub>2</sub> /воздух	$T = 300$ К, $p = 0,1 \div 10$ атм, 40 % H <sub>2</sub> + воздух	Пламя, мод.	$1,5H_2 + 0,75O_2 \rightarrow 1,5H_2O$ , $n = 2,25$ , $A = 2,02 \cdot 10^{11}$ [моль, см, с], $E =$ = 5,3 ккал/моль, приведены данные о зависимости кинетических параметров от состава, T <sub>0</sub> и p <sub>0</sub>	[17, 18]
H <sub>2</sub> /S <sub>2</sub>	$T = 873 \div 1133$ К, $p = 1,3 \div 3,0$ атм	—	Расчет из данных по распаду H <sub>2</sub> S и термодин. данных: $W = 132 \cdot \exp(-25,1/RT) \cdot p(H_2) \cdot (p(S_2))^{0,5}$ , где p(i) — парциальное давление, [A] = моль/(см <sup>3</sup> ·с·атм <sup>3/2</sup> ), [E] = ккал/моль	[27]
H <sub>2</sub> /S <sub>2</sub>	$T = 875 \div 1563$ К, $p = 1$ атм	Р. пр.	$H_2 + 1/2S_2 = H_2S$ , $-d[H_2]/dt = k_1[H_2][S_2] - k_{-1}[H_2S]$ , $k_1 = 4,3 \cdot 10^6 \times$ $\times \exp(-26/RT)$ , 1/(атм·с), $k_{-1} = 3,6 \cdot 10^8 \exp(-48/RT)$ , с <sup>-1</sup> , [с] = атм, [E] = = ккал/моль	[28]
H <sub>2</sub> S, разложение	$T = 873 \div 1133$ К, $p = 1,3 \div 3$ атм	Р. пр.	$H_2S(g) = H_2(g) + 0,5S_2(g)$ , $W = 784,1 \cdot \exp(-46,8/RT) \cdot p(H_2S) - 132 \times$ $\times \exp(-25,1/RT) \cdot p(H_2)(p(S_2))^{0,5}$ [ккал, моль, см, с, атм], p(i) — парц. давлени- е, атм	[27]

1	2	3	4	5
H <sub>2</sub> S/O <sub>2</sub>	—	Р. пр.	$\tau = 10^{-12,3} \exp(26,2/RT) \cdot [H_2S]^{-0,45} [O_2]^{-0,33}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $[E] =$ = ккал/моль	[29]
H <sub>2</sub> S/O <sub>2</sub>	—	Пламя	$E = 26,0 \text{ ккал/моль}$	[30]
H <sub>2</sub> S/SO <sub>2</sub>	$T = 1073 \div 1473 \text{ К}$	Р. пр.	Реакция Клауса (газофазн.): $H_2S + 0,5SO_2 = H_2O + 0,75S_2$ , $-dZ/dl = (1,59 \cdot 10^6/N(H_2S)) \cdot \exp(-59,8/RT) \cdot S \cdot ([H_2S] [SO_2]^{0,5} - [H_2O] [S_2]^{0,75}/K_p)$ , $Z$ — доля прореагировавшего H <sub>2</sub> S, $l$ — длина реактора, $S$ — сечение реактора, $N(H_2S)$ — мольный расход (моль/с), $K_p$ — константа равновесия, $[E] =$ = кДж/моль, $[c] = \text{моль/м}^3$	[31]
NO	$p = 1 \text{ атм}$		$2NO = N_2 + O_2$ , $A = 8 \cdot 10^8 T \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$ , $E = 50 \text{ ккал/моль}$ , $n = 2$	[32]
NO/Ar	$T = 2000 \div 4000 \text{ К}$ , $[NO] = (0,1-6) \cdot 10^{-6}$ , $[H_2] = (0,1-3,6) \cdot 10^{-6}$ , $[Ar] = (1-9) \cdot 10^{-6}$	УВ	$-d[NO]/dt = 10^{9,7} \exp(-44/RT) \cdot [NO] ([NO]_0 - [NO])^{0,45}$ , $-d[O]/dt = 10^{5,3} \exp(-62/RT) \cdot [NO]^{0,95}$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$	[33]
NO/H <sub>2</sub> /Ar	$T = 2000 \div 4000 \text{ К}$ , $[NO] = (0,1-6) \cdot 10^{-6}$ , $[H_2] = (0,1-3,6) \cdot 10^{-6}$ , $[Ar] = (1-9) \cdot 10^{-6}$	УВ	$-d[NO]/dt \sim [NO] ([NO]_0 - [NO])^{0,35} [H_2]_0^{0,3}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$	[33]
NO/O <sub>2</sub> /NH <sub>3</sub>	$T = 1145 \div 1227 \text{ К}$ , $p = 1,07 \div 2,14 \text{ атм}$	Р. стр.	$[He] \gg [O_2] \gg [NH_3] \gg [NO]$ , $d(\ln([NO] - [NO]_{ss}))/dt = -k \cdot [O_2]^{1/2} [NH_3]^{1/2} [He]^{-1}$ , $k = 1,8 \cdot 10^{12} \times$ $\times \exp(46,5/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/л}$	[34]
NO/O <sub>2</sub> /O <sub>3</sub> /N <sub>2</sub>	$T = 293 \div 323 \text{ К}$	Р. стр.	$2NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$ (темновая), $W = k \cdot (p(NO))^2 \cdot p(O_3)$ , $k = 1,36 \cdot 10^{-2} \exp(-4660/RT)$ , $[E] = \text{кДж/моль}$ , $[W] = \text{мПа}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ , $p(i)$ — парциальное давление	[35]

NH <sub>3</sub> /Ar, пиролиз	$T = 2100 \div 2900 \text{ K}$ , $[M] = (1,2-10) \cdot 10^{-5}$	УВ	$-d[\text{NH}_3]/dt = k \cdot [\text{NH}_3] [\text{Ar}]$ , $k = 10^{15,64} \exp(-79,5/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[k] = \text{см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$	[36]
NH <sub>3</sub> /N <sub>2</sub> O/Ar	$T = 1600 \div 3200 \text{ K}$	УВ	$\tau^{-1} [\text{N}_2\text{O}]^{-1} = 3,55 \cdot 10^{14} \exp(-34,3/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $[\tau] = \text{с}^{-1}$	[37]
NH <sub>3</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 1500 \div 4500 \text{ K}$	УВ	$\tau^{-1} [\text{O}_2] = 3,9 \cdot 10^{14} \exp(-41,2/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $[\tau] = \text{с}^{-1}$	[37]
NH <sub>3</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 1106 \div 1377 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$ , $\Phi = 0,53 \div 4,93$	Р. стр.	$-d[\text{NH}_3]/dt = k \cdot [\text{NH}_3]^{0,86} [\text{O}_2]^{1,04}$ , $k = 4,9 \cdot 10^{14} \exp(-39,031/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[k] = (\text{см}^3)^{0,9}/(\text{моль}^{0,9} \cdot \text{с})$ . Рекомендованные данные. Приведены данные других авторов	[15]
NH <sub>3</sub> /воздух	$T = 1480 \div 2430 \text{ K}$ , 10 и 20 % NH <sub>3</sub> в воздухе, $[M] = (3-7) \cdot 10^{-4}$	УВ	$\tau \cdot [\text{O}_2] = 10^{-10,27} \exp(28/RT)$ , $[c] = \text{моль/л}$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[\tau] = \text{с}^{-1}$	[38]
N <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 1650 \div 2000 \text{ K}$	Гор.	$\text{N}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{NO}$ , образование NO при сжигании прир. газов, $d[\text{NO}]/dt =$ $= 2 \cdot 10^{12} \exp(-69000/T) [\text{O}_2]^{0,9} [\text{N}_2]^{0,8}$ , $[c] = \text{моль/л}$	[39]
N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , разложение	$p = 2 \div 8 \text{ Торр}$	Пламя, $U_n$	$E = 36 \text{ ккал/моль}$ , $n = 2$	[40]
N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , разложение	$T = 893 \div 993 \text{ K}$ , $p = 10 \div 80 \text{ Торр}$	Т. вз.	$\tau = 5,7 \cdot 10^{-21} \cdot T^2 \exp(30000/T)$ , $[\tau] = \text{с}^{-1}$	[41]
N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , разложение	$T = 750 \div 1000 \text{ K}$ , $[\text{N}_2\text{H}_4] < 5 \%$	Р. стр. адиаб.	$\text{N}_2\text{H}_4 \rightarrow 0,9\text{NH}_3 + 0,5\text{N}_2 + 0,6\text{H}_2$ , $n \sim 1$ , $k = 10^{10,33} \exp(-36,170/RT)$ , $[k] = \text{с}^{-1}$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ . Добавка H <sub>2</sub> O снижает скорость приблизительно на порядок. Величина скорости не зависит от концентрации при $[\text{H}_2\text{O}] > 1 \%$	[42]
N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , разложение (ж.— пар)	$T = 475 \div 590 \text{ K}$ , $p = 0,1 \div 12,5 \text{ мПа}$	Р. ст.	Гетерогенная реакция в закрытом титановом сосуде, $\text{N}_2\text{H}_4 \rightarrow 1/3\text{N}_2 + 4/3\text{NH}_3$ , $A = 1,6 \cdot 10^6 \text{ моль/(м}^2 \cdot \text{с)}$ , $n = 0$ , $E = 98,3 \text{ кДж/моль}$	[43]
N <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	$T = 1300 \div 1600 \text{ K}$	УВ	$\lg k = 12,8 - 52/(2,3RT)$ при $M = 7,5 \cdot 10^{-5} \text{ моль/см}^3$ , $\lg k = 12,0 - 48/(2,3RT)$ при $M = 2,5 \cdot 10^{-5} \text{ моль/см}^3$ , $n = 1$ , $[E] = \text{ккал/моль}$	[36]

1	2	3	4	5
$N_2H_4/H_2O$	$T = 900 \div 1150 \text{ K}$ , $p = 5 \div 15 \text{ Торр}$	—	$n = 1$ , $k = 4 \cdot 10^{12} \exp(-60/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $[k] = \text{с}^{-1}$	[44]
$N_2H_4/NO_2$	$T = 810 \div 1040 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Р. стр. адиаб.	Стадия 1: $N_2H_4 + NO_2 \rightarrow 0,5N_2H_4 + H_2O + NO + 0,5N_2$ (840 ÷ 880 K), $-d[N_2H_4]/dt = 10^{15,83} \exp(-26,7/RT) \cdot [N_2H_4] [NO_2]$ . Стадия 2: $0,5N_2H_4 + NO \rightarrow H_2O + N_2$ (980 ÷ 1040 K), $-d[N_2H_4]/dt = 10^{10,17} \exp(-39,6/RT) \cdot [N_2H_4]$ . Для стехиометрической смеси в каждой стадии расходуется приблизительно 50 % $N_2H_4$ . $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$	[45]
$N_2H_4/O_2$	$T = 800 \div 1060 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Р. стр. адиаб.	$-d[N_2H_4]/dt = 10^{9,91} \exp(-37,2/RT) \cdot [N_2H_4]$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] =$ $= \text{моль/см}^3$ , $[k] = \text{с}^{-1}$	[45]
$N_2H_4/O_2/NO$	$T = 800 \div 1060 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Р. стр. адиаб.	$-d[N_2H_4]/dt = 10^{10,35} \exp(-39,1/RT) \cdot [N_2H_4]$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] =$ $= \text{моль/см}^3$ , $[k] = \text{с}^{-1}$	[45]
$N_2H_4/NO$	$T = 800 \div 1060 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Р. стр. адиаб.	$-d[N_2H_4]/dt = 10^{11,48} \exp(-45,4/RT) \cdot [N_2H_4]$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] =$ $= \text{моль/см}^3$ , $[k] = \text{с}^{-1}$	[45]
$N_2O$ , разложение	$T = 1406 \div 1515 \text{ K}$ , $p = 0,3 \div 0,6 \text{ МПа}$ ; $T = 1280 \div 1400 \text{ K}$ , $p = 0,7 \div 4,1 \text{ МПа}$	Тем-ра за- жигания	$A = 10^{8,7} \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$ , $E = 130 \text{ кДж/моль}$ , $n \sim 2$ , $A = 10^{13,2} \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$ , $E = 240 \text{ кДж/моль}$	[46]
$N_2O/H_2/Ar$	$T = 2200 - 3000 \text{ K}$ , $[M] > 10^{-7}$	УВ	$\{M\}^{-1} d(\ln [N_2O])/dt = 1,4 \cdot 10^{13} \exp(-35,6/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] =$ $= \text{моль/см}^3$	[47]
$HN_3/N_2$	$p = 12 \div 250 \text{ Торр}$ , $HN_3/(HN_3 + N_2) = 0,2 \div 1$	Пламя, $U_n$	$E \approx 23 \text{ ккал/моль}$ при $n(HN_3) = 2$ , $E \approx 34 \text{ ккал/моль}$ при $n(HN_3) = 1$ , $n = 2$ (крит. диам.)	[48]
$SO_2/H_2/He$	$T = 1000 \div 1200 \text{ K}$ , $p = 65,5 \div 300 \text{ Торр}$ , $H_2/SO_2 = 0,5 \div 20$	Р. ст.	$3H_2 + SO_2 = H_2S + 2H_2O$ , $-d[SO_2]/dt = 2,5 \cdot 10^{-13} \exp(-167/RT) \cdot [H_2] [SO_2]$ , $[W] = 1/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$ , $[E] =$ $= \text{кДж/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$	[49]

SO <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	--	Гор.	Образование SO <sub>3</sub> из SO <sub>2</sub> в продуктах горения серпистых газов, $-d[SO_3]/dt = 3,0 \cdot \exp(-9500/T) \cdot [O_2]^{0,22} [SO_2]^{0,78} - 0,5 \cdot 10^5 \exp(-20000/T) \cdot [SO_3]$ , $[c] =$ объемн. %	[39]
CO/NO	--	--	Гетерогенная реакция (графит): $CO + NO = 1/2 N_2 + CO_2$ , $-d[NO]/dt = \{k_1 p(NO) \cdot (k_2 p(CO) + k_3)\} / \{k_1 p(NO) + k_2 p(CO) + k_3\}$ , $k_1 = 2,1 \cdot 10^{-2} \exp(-26/RT)$ моль/(с·см <sup>2</sup> ·атм), $k_2 = 7,4 \cdot 10^{-5} \exp(-19/RT)$ моль/(с·см <sup>2</sup> ·атм), $k_3 = 1,5 \cdot 10^{-3} \exp(-40/RT)$ моль/(с·см <sup>2</sup> ), $[E] =$ ккал/моль	[50]
CO/O <sub>2</sub>	$T = 882 \div 926$ К	Р. ст.	Начальная скорость окисления CO. Исходный состав: 41 Торр C <sub>2</sub> O <sub>3</sub> + 123 Торр O <sub>2</sub> , $E = 105$ ккал/моль	[51]
CO/O <sub>2</sub>	$T = 1940 \div 2310$ К, бедные смеси	Пламя	Окисление в нослепламенной области. При $[O_2] > 0,06$ $n(O_2) = 0,2$ ; при $[O_2] < 0,06$ $n(O_2) = 1$ , $-d[CO]/dt = 2,7 \cdot 10^5 \exp(-13500/T) \cdot [CO]$ , $[c] =$ моль/см <sup>3</sup>	[52]
CO/O <sub>2</sub>	$T = 840 \div 2360$ К, $p = 1$ атм	Р. пр., пламя	$CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$ , $-d[CO]/dt = 1,3 \cdot 10^{14} \exp(-30,0/RT) \cdot [CO] [O_2]^{0,5} [H_2O]^{0,5}$ , $[c] =$ моль/см <sup>3</sup> , $[E] =$ ккал/моль, $[W] =$ моль/(с·см <sup>3</sup> ). Рекомендованные данные. Приведены данные других авторов	[16]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub>	--	Пламя	$CO + H_2O = CO_2 + H_2$ , $2H_2 + O_2 = 2H_2O$ . Скорости реакций определяются через скорости элементарных стадий и приведены в работе	[53]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O	$T = 1023 \div 1373$ К, $[O_2] > 5$ %	Р. пр.	$W = 1,04 \cdot 10^{12} T^{-2,5} \exp(-32/RT) \cdot [CO] [O_2]^{0,25} [H_2O]^{0,5}$ , $[W] =$ моль/(см <sup>3</sup> ·с), $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/см <sup>3</sup>	[54]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O	$p = 1$ атм, $T = 1600 \div 2100$ К, $T = 900 \div 1000$ К, $T = 650 \div 750$ К	--	$[\tau] = 3,83 \cdot 10^7 \exp(7,98/RT) \cdot [CO] [H_2O]^{0,5} [O_2]^{0,25}$ , $CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$ , $-d[CO]/dt = 1,06 \cdot 10^{11} \exp(-21/RT) \cdot [CO] [O_2]^{0,25} [H_2O]^{0,5}$ , $-d[CO]/dt = 7,2 \cdot 10^{20} \exp(-69/RT) \cdot [CO] [O_2]^{0,25} [H_2O]^{0,5}$ , $-d[CO]/dt = 5,8 \cdot 10^{14} \exp(-56/RT) \cdot [CO] [O_2]^{0,25} [H_2O]^{0,5}$ , $[c] =$ моль/см <sup>3</sup> , $[E] =$ ккал/моль, $[\tau] =$ с <sup>-1</sup>	[55]



1	2	3	4	5
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O	$T = 1123 \div 1298 \text{ K}$ , $p = 1,22 \div 2,44 \text{ атм}$	Р. пр.	$\text{CO} + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ $-d[\text{CO}]/dt = 1,50 \cdot 10^{10} \exp(-23,6/RT) \cdot [\text{CO}] [\text{O}_2]^{0,25} [\text{H}_2\text{O}]^{0,5}$ , $[k] = (\text{см}^3/\text{моль})^{3/4} \cdot \text{с}^{-1}$ , $[c] = \text{моль}/\text{см}^3$ , $[E] = \text{ккал}/\text{моль}$	[56]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O	$T = 1063 \div 1593 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	—	$\text{CO} + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ , $-d[\text{CO}]/dt = 1,8 \cdot 10^{12} \exp(-28,3/RT) \cdot [\text{CO}] [\text{O}_2]^{0,25} [\text{H}_2\text{O}]^{0,5}$ , $[c] = \text{моль}/\text{см}^3$ , $[E] = \text{ккал}/\text{моль}$	[57]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O	$T = 1030 \div 1230 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$ , $\Phi = 0,04 \div 0,5$ , $[\text{H}_2\text{O}] = 0,1 \div 3 \%$	Р. пр. турб.	$-d[\text{CO}]/dt = 10^{14,6} \exp(-40/RT) \cdot [\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]^{0,5} [\text{O}_2]^{0,25}$ , $[c] = \text{моль}/\text{см}^3$ , $[E] = \text{ккал}/\text{моль}$	[58]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O/Cl <sub>2</sub>	$T = 1350 \div 2200 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Мод.	$[\tau] \cdot [\text{CO}]^{0,2} [\text{H}_2\text{O}]^{0,7} [\text{O}_2]^{0,6} [\text{Cl}_2]^{-0,6} [\text{N}_2]^{-0,2} = 10^{-11,8} \exp(32/RT)$ , $[E] =$ $= \text{ккал}/\text{моль}$ , $[c] = \text{моль}/\text{см}^3$	[59]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O/HCl	$T = 1350 \div 2200 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Мод.	$[\tau] [\text{CO}]^{0,9} [\text{H}_2\text{O}]^{0,4} [\text{O}_2]^{0,6} [\text{HCl}]^{-0,85} [\text{N}_2]^{-0,2} = 10^{-12,2} \exp(27/RT)$ , $[E] =$ $= \text{ккал}/\text{моль}$ , $[c] = \text{моль}/\text{см}^3$	[59]
CO/SO <sub>2</sub> /Ar	$T = 1770 \div 2453 \text{ K}$	УВ	$\Delta\text{CO}_2/\tau = k \cdot [\text{Ar}]^{0,57} [\text{CO}]^{0,76} [\text{SO}_2]^{0,67}$ , $k = 2,7 \cdot 10^{12} \exp(-48,3/RT) \text{ см}^3/(\text{моль} \times$ $\times \text{с})$ , $[E] = \text{ккал}/\text{моль}$	[60]
CO/O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O/N <sub>2</sub>	$T = 1280 \div 1684 \text{ K}$ , $p = 0,15 \div 1 \text{ атм}$ , $\Phi = 0,136 \div 1,9$ , $\text{N}_2/\text{O}_2 = 1,3 \div 9,07$	Р. см.	$-d[\text{CO}_2]/dt = k f_{\text{CO}} f_{\text{O}_2}^{0,3} f_{\text{H}_2\text{O}}^{0,5} (p/RT)^{1,8}$ , $k = 1,2 \cdot 10^{11} \exp(-16/RT)$ . При $n(\text{O}_2) = 0,25$ и $n(\text{CO}) = 1$ , $k = 9,5 \cdot 10^7 \times$ $\times \exp(-30/RT)$ , $[E] = \text{ккал}/\text{моль}$ , $f_i$ — мольные доли, $[p] = \text{атм}$ , $[W] =$ $= \text{моль}/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$	[61]
CO/воздух	—	Пламя, $U_n$	$-d[\text{CO}]/dt = 7,05 \cdot 10^6 \exp(-96800/RT) \cdot [\text{CO}]$ , $[E] = \text{кДж}/\text{кмоль}$ , $[k] = 1/\text{с}$	[26]
CO/воздух, влажн. смесь	—	Пламя, $U_n$	$-d[\text{CO}]/dt = 1,4 \cdot 10^{12} \exp(-96300/RT) \cdot [\text{CO}]$ , $[E] = \text{кДж}/\text{моль}$ , $[k] = 1/\text{с}$	[26]

CS <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 343 \div 573 \text{ K}$ , $p = 0.5 \div 350 \text{ Торр}$ , $[O_2]/[CS_2] = 2.5 \div 100$ , $[M]/[CS_2] = 0 \div 50$	Самовоспл.	$\tau \sim \exp(-21.5/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$	[62]
CH <sub>4</sub> , пиролиз	$T = 1400 \div 2800 \text{ K}$ , CH <sub>4</sub> /He/Ar = 1 : 1 : 8	УВ	$E = 85 \text{ ккал/моль}$ , $n(\text{CH}_4) = 1$	[63]
CH <sub>4</sub> /ClO <sub>2</sub>	$p = 10 \div 300 \text{ Торр}$ , (20 ÷ 80) % ClO <sub>2</sub> в CH <sub>4</sub>	Пламя	$n = 1.77 \div 2.3$ , $E = 10.9 \text{ ккал/моль}$	[64]
CH <sub>4</sub> /N <sub>2</sub> , пиролиз	$T = 3000 \div 5200 \text{ K}$ , $p \sim 10^5 \text{ Па}$	Плазма N <sub>2</sub>	1. CH <sub>4</sub> + M → C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> + M, $k_1 = 6 \cdot 10^{12} \exp(-209/RT)$ , 2. C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> + M → C + H <sub>2</sub> , $k_2 = 4 \cdot 10^{13} \exp(-226/RT)$ , 3. CH <sub>4</sub> + N <sub>2</sub> → HCN + H <sub>2</sub> , $k_3 = 4 \cdot 10^{10} \exp(-96/RT)$ , 4. HCN → C + H <sub>2</sub> + N <sub>2</sub> , $k_4 = 2 \cdot 10^{12} \exp(-142/RT)$ , $[E] = \text{кДж/}$ моль, $[c] = \text{моль/см}^3$	[65]
CH <sub>4</sub> /N <sub>2</sub> O/Ar	$T = 1600 \div 3200 \text{ K}$	УВ	$\tau^{-1}[\text{CH}_4] = 2.98 \cdot 10^{14} \exp(-29.5/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $[\tau] = \text{с}^{-1}$	[37]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> , медл. р.	$T = 1200 \div 1400 \text{ K}$	Р. пр.	$-d[\text{CH}_4]/dt = 7 \cdot 10^8 T^{-1} \exp(-60/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{-0.5} [\text{O}_2]^{1.5}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $[E] = \text{ккал/моль}$	[54]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> , медл. р.	$T = 700 \div 786 \text{ K}$ , $p = 100 \div 375 \text{ Торр}$	Р. ст.	При максим. [CH <sub>2</sub> O]: $n(\text{CH}_4) = 1$ , $n(\text{O}_2) = 0$ , $E = 7.8 \text{ ккал/моль}$ , при максим. скорости реакции: $n(\text{CH}_4) = 1.62$ , $n(\text{O}_2) = 0.96$ , $n(\text{общ. давл.}) = 2.7$ , $E =$ $= 43 \text{ ккал/моль}$	[66]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 2000 \div 2200 \text{ K}$ , сильно разб. смеси	УВ	$\lg(\tau \cdot [\text{O}_2]^{0.5} [\text{Ar}]^{0.5}) = -13.18 + 56000/(4.58 T)$ , $[E] = \text{кал/моль}$ , $[c] = \text{моль/л}$	[67]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 673 \div 940 \text{ K}$ $p = 5 \div 30 \text{ Торр}$	Р. ст.	Приведены данные о $E$ для двух реакционных сосудов в зависимости от сос- тава, $T_0$ , $n(\text{O}_2) = 2.4 \div 3$ , $n(\text{CH}_4) = -0.14 \div 1.45$ , $n(\text{давл.}) = 3 \div 4.35$ , $n(\text{N}_2) =$ $= 0.1 \div 0.43$	[68]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	—	Пламя	Константа скорости для смешанной модели: C <sub>n</sub> H <sub>m</sub> + (n/2)O <sub>2</sub> → (m/2)H <sub>2</sub> + nCO, $k = 203T \cdot \exp(-4730/T)$ , $[k] = \text{см}^3/2(\text{моль}^{1/2} \cdot \text{с})$ . Детальная схема—12 ста- дий, включая образование NO	[69]

1	2	3	4	5
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	$p \sim 100$ Торр	УВ	$\tau = A \cdot \exp(46,5/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{0,33} [\text{O}_2]^{-1,03}$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $ \tau  = \text{с}^{-1}$	[70]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 1100 \div 1400$ К, $p = 1$ атм, $\Phi = 0,05 \div 0,5$	Р. пр. турб.	$-d[\text{CH}_4]/dt = 10^{13,2} \exp(-48,4/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{0,7} [\text{O}_2]^{0,8}$ , $d[\text{CO}_2]/dt = 10^{14,74} \times$ $\times \exp(-43/RT) \cdot [\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]^{0,5} [\text{O}_2]^{0,25}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$ , $[E] = \text{ккал/моль}$	[58]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 1970 \div 2190$ К, $[\text{H}_2\text{O}]/[\text{H}_2] = 0,6 \div 1,1$	Гор.	Догорание метана в богатых смесях: $-d[\text{CH}_4]/dt = 9 \cdot 10^{14} \exp(-117/RT) \cdot ([\text{CH}_4] [\text{H}_2\text{O}]/[\text{H}_2])$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[W] = \text{моль/(см}^3 \cdot \text{с)}$	[71]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	$T = 1250 \div 1700$ К, $p = 0,63 \div 8$ атм	УВ	$t \sim p^{-0,7}$ , $n = 4,5$	[72]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—	Пламя	$E = 38 \div 41$ ккал/моль	[30]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—	Пламя, мод.	$W = 1,3 \cdot 10^8 \exp(-48,4/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} [\text{O}_2]^{1,3}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—	Пламя, мод.	$W = 8,3 \cdot 10^5 \exp(-30,0/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} [\text{O}_2]^{1,3}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—	Пламя, мод.	$W = 2,8 \cdot 10^9 \exp(-48,4/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} [\text{O}_2]^{1,3}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—	Пламя, мод.	$W = 1,5 \cdot 10^7 \exp(-30,0/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} [\text{O}_2]^{1,3}$ , [см, с, моль, ккал]	[9]**
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—	Пламя, мод.	$W = 4,0 \cdot 10^9 \exp(-48,4/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} [\text{O}_2]^{1,3}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—	Пламя, мод.	$W = 2,3 \cdot 10^7 \exp(-30,0/RT) \cdot [\text{CH}_4]^{-0,3} [\text{O}_2]^{1,3}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
		Пламя	1. $\text{CH}_4 + 2\text{H} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 4\text{H}_2$ , 2. $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$ , 3. $2\text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}$ , 4. $3\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{H}$ .	

CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub>	—		<p>При квазистационарности [H] механизм имеет вид:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. CH<sub>4</sub> + O<sub>2</sub> → CO + H<sub>2</sub> + H<sub>2</sub>O,</li> <li>2. CO + H<sub>2</sub>O = CO<sub>2</sub> + H<sub>2</sub>,</li> <li>3. O<sub>2</sub> + 2H<sub>2</sub> = 2H<sub>2</sub>O.</li> </ol> <p>Скорости реакций выражаются через скорости элементарных стадий и приведены в работе</p>	[11, 73, 74]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> /Ar	T = 1200 ÷ 2000 К, p = 3 ÷ 300 атм, 2[CH <sub>4</sub> ]/[O <sub>2</sub> ] = 0,2 ÷ 2,0	УВ	<p>Для 1 % CH<sub>4</sub> и O<sub>2</sub>: τ = 2,5 · 10<sup>-15</sup> exp (222/RT) · [CH<sub>4</sub>]<sup>0,32</sup>[O<sub>2</sub>]<sup>-1,02</sup>, [E] = κДж/моль, [c] = моль/см<sup>3</sup></p>	[75]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> /Ar	T = 1350 ÷ 1850 К, [M] = 3 · 10 <sup>-5</sup>	УВ	<p>τ = 1,8 · 10<sup>-14</sup> exp (26000/T) · [CH<sub>4</sub>]<sup>0,4</sup>[O<sub>2</sub>]<sup>-1,0</sup>. Приведены данные других авторов. Исследовано влияние добавок C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, n-C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>, [c] = моль/см<sup>3</sup></p>	[76]
CH <sub>4</sub> /O <sub>2</sub> /N <sub>2</sub>	T = 1450 ÷ 1750 К, p = 0,3 ÷ 0,8 атм, Φ = 0,5 ÷ 0,8	Р. пр., гор.	<p>—d[CH<sub>4</sub>]/dt = k' · f<sub>CH<sub>4</sub></sub><sup>1/2</sup>f<sub>O<sub>2</sub></sub><sup>1/2</sup>f<sub>H<sub>2</sub>O</sub> (p/RT)<sup>2</sup>, k' = 5,3 · 10<sup>15</sup> exp (-57/RT),  —d[CO]/dt = k'' · f<sub>CO</sub><sup>1/2</sup>f<sub>O<sub>2</sub></sub><sup>1/2</sup>f<sub>H<sub>2</sub>O</sub> (p/RT)<sup>2</sup>, k'' = 1,8 · 10<sup>10</sup> exp (-25/RT).</p> <p>Для двухстадийной реакции:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. CH<sub>4</sub> → CO + H<sub>2</sub>O,</li> <li>2. CO → CO<sub>2</sub>,</li> </ol> <p>d[CH<sub>4</sub>]/dt = -k<sub>1</sub> · f<sub>CH<sub>4</sub></sub><sup>1/2</sup>f<sub>O<sub>2</sub></sub><sup>1/2</sup>f<sub>H<sub>2</sub>O</sub> (p/RT)<sup>2</sup>, k<sub>1</sub> = 1,7 · 10<sup>16</sup> exp (-60/RT),  d[CO]/dt = -k<sub>2</sub> · f<sub>CO</sub><sup>1/2</sup>f<sub>O<sub>2</sub></sub><sup>1/2</sup>f<sub>H<sub>2</sub>O</sub> (p/RT)<sup>2</sup>, k<sub>2</sub> = 3,5 · 10<sup>9</sup> exp (-20/RT), [E] = ккал/моль, f<sub>i</sub> — мольные доли, [W] = моль/(л·с)</p>	[77]
CH <sub>4</sub> /воздух	T = 1400 ÷ 1800 К	Р. тур.	<p>Скорость роста сажи:  d[S]/dt = 3,87 · 10<sup>8</sup> exp (-57,6/RT) · (x/T<sup>0,5</sup>) · c<sup>2/3</sup> · N<sub>s</sub><sup>1/3</sup>,  c — концентрация сажи, мг/мл; x — мольная доля CH<sub>4</sub>, N<sub>s</sub> — число частиц сажи/мл при н. у. (3 · 10<sup>10</sup>—4,5 · 10<sup>12</sup>), [E] = ккал/моль</p>	[78]
CH <sub>4</sub> /воздух	p <sub>0</sub> = 0,25—1,5 атм, Φ = 0,7 ÷ 1,2	Пламя, U <sub>n</sub>	<p>d[CO<sub>2</sub>]/dt = 3,36 · 10<sup>12</sup> exp (-39,08/RT) · [CO] [O<sub>2</sub>]<sup>1/4</sup>[H<sub>2</sub>O]<sup>1/2</sup>, [E] = ккал/моль, [c] = моль/см<sup>3</sup></p>	[79]
CH <sub>4</sub> /воздух	Φ = 0,65 ÷ 1,30	Пламя	E = 38 ккал/моль, n = 1	[80]

1	2	3	4	5
CH <sub>4</sub> /воздух	—	Пламя, U <sub>n</sub>	$-d[\text{CH}_4]/dt = 5,6 \cdot 10^{12} \exp(-103800/RT) \cdot [\text{CH}_4]$ , [E] = кДж/кмоль	[26]
CH <sub>4</sub> /воздух	T = 300 К, p = 0,1 ÷ 10 атм, стех. смесь	Пламя, мод.	0,42CH <sub>4</sub> + 0,84O <sub>2</sub> → 0,42CO <sub>2</sub> + 0,84H <sub>2</sub> O, n = 1,26, A = 4,69 · 10 <sup>7</sup> (моль, см, с), E = 18,7 ккал/моль. Приведены данные о зависимости кинетических параметров от состава, T <sub>0</sub> и p <sub>0</sub>	[17, 18]
CH <sub>4</sub> /воздух	—	Пламя	1. CH <sub>4</sub> + 2H + H <sub>2</sub> O → CO + 4H <sub>2</sub> , 2. CO + H <sub>2</sub> O = CO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> , 3. 2H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> → 2H <sub>2</sub> O, 4. 3H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> = 2H <sub>2</sub> O + 2H. Скорости реакций выражаются через скорости элементарных стадий и приведены в работе	[11]
CH <sub>4</sub> /воздух	p = 1 атм, Φ = 0,6 ÷ 1,6	Пламя, мод.	W = 2,5 · 10 <sup>12</sup> exp(-24355/T) · [CH <sub>4</sub> ] <sup>10,2</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>1,3</sup> , [c] = моль/см <sup>3</sup>	[81]
CH <sub>4</sub> /воздух	Бедные смеси	Гор.	Анализ кинетического процесса. Глобальная модель представлена системой кинетических уравнений для CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, CO и H <sub>2</sub>	[1]
CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub> /O <sub>2</sub>	—	УВ	τ = A exp(33,5/RT) · [CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub> ] <sup>-0,8</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>x</sup> , [E] = ккал/моль, [c] = моль/см <sup>3</sup>	[70]
CH <sub>3</sub> OH/O <sub>2</sub>	T = 1000 ÷ 1120 К Φ = 0,03 ÷ 3,16	Р. пр. адiab.	CH <sub>3</sub> OH + O <sub>2</sub> → CO + 2H <sub>2</sub> O, CO + (1/2)O <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> . Для бедных составов при T = 1000 ÷ 1120 К: -d[CH <sub>3</sub> OH]/dt = 10 <sup>11,53</sup> exp(-54,8/RT) · [CH <sub>3</sub> OH] <sup>0,81</sup> , для богатых составов при T = 1000 ÷ 1075 К: -d[CH <sub>3</sub> OH]/dt = 10 <sup>31,54</sup> exp(-123/RT) · [CH <sub>3</sub> OH] <sup>1,55</sup> , [E] = ккал/моль, [c] = моль/см <sup>3</sup>	[82]
CH <sub>3</sub> OH/O <sub>2</sub>	T = 1545 ÷ 2180 К, Φ = 0,375 ÷ 3,0	УВ	τ[O <sub>2</sub> ] <sup>0,5</sup> [CH <sub>3</sub> OH] <sup>0,1</sup> = 2,1 · 10 <sup>-13</sup> exp(151,5/RT), [кДж, с, моль, см]	[83]
CH <sub>3</sub> OH/O <sub>2</sub>	T = 1200 ÷ 1800 К, 1,5[CH <sub>3</sub> OH]/[O <sub>2</sub> ] = 0,2 ÷ 2,0, [M] = 10 <sup>-5</sup> ÷ 2 · 10 <sup>-4</sup>	УВ	Экспериментальные данные: τ = 1,4 · 10 <sup>-16</sup> exp(201/RT)[CH <sub>3</sub> OH] <sup>-0,11</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>-0,19</sup> [Ar] <sup>-0,62</sup> . Моделирование кинетики: τ ~ exp(204/RT) · [CH <sub>3</sub> OH] <sup>-0,25</sup> [O <sub>2</sub> ] <sup>-0,18</sup> [Ar] <sup>-0,5</sup> , [E] = кДж/моль, [c] = моль/см <sup>3</sup>	[84]

$\text{CH}_3\text{OH}/\text{O}_2$	$T = 890 \div 1000 \text{ K}$ , $p = 0,5 \div 1 \text{ атм}$	УВ, р. ст.	$\tau = 10^{-16,67} \exp(37,17/RT) [\text{CH}_3\text{OH}]^{-0,74} [\text{O}_2]^{-0,238} [\text{M}]^{-0,22}$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$	[85]
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}/\text{O}_2$	—	Пламя	1. $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + 2\text{H} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$ , 2. $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + \text{H}_2$ , 3. $2\text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}$ , 4. $\text{O}_2 + 3\text{H}_2 = 2\text{H} + 2\text{H}_2\text{O}$ . Скорости выражаются через скорости элементарных стадий и приведены в работе	[73]
$\text{CH}_3\text{OH}/\text{O}_2$	—	Пламя, мод.	$W = 3,2 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [\text{CH}_3\text{OH}]^{0,25} [\text{O}_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$\text{CH}_3\text{OH}/\text{O}_2$	—	Пламя, мод.	$W = 3,7 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [\text{CH}_3\text{OH}]^{0,25} [\text{O}_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$\text{CH}_3\text{OH}/\text{O}_2$	—	Пламя, мод.	$W = 7,3 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [\text{CH}_3\text{OH}]^{0,25} [\text{O}_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$\text{CH}_3\text{ONO}$ , разложение	$T = 290 \div 1350 \text{ K}$ , $p = 50 \div 500 \text{ Торр}$	—	$\text{CH}_3\text{NO}_2 \rightarrow \text{NO} + (1/2) \text{HCHO} + (1/2) \text{CH}_3\text{OH}$ , $A = 1,84 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ , $E = 36,4 \text{ ккал/моль}$ , $n = 1$	[86]
$\text{CH}_3\text{ONO}_2$ , разложение	$p = 35 \text{ Торр}$	Пламя, $U_n$	$\text{CH}_3\text{ONO}_2 \rightarrow \text{NO} + \text{CO} + \text{H}_2\text{O} + 0,5 \text{ H}_2$ , $k = 10^{15} \exp(-22/RT) \text{ см}^3/(\text{моль} \times \text{с})$ , $n = 2$ , $[E] = \text{ккал/моль}$	[87]
$\text{CH}_3\text{ONO}_2$ , пиролиз	$T = 880 \div 1250 \text{ K}$ , $p = 2,8 \div 18,6 \text{ атм}$ , (0,25—1,75)% $\text{CH}_3\text{ONO}_2$ в Ar	УВ	Скорость второй стадии распада: $-d[\text{HCHO}]/dt = k \cdot [\text{Ar}]^{0,26} [\text{HCHO}]^{1,6}$ , $k = 9,52 \cdot 10^{12} \exp(-24,2/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[k] = \text{моль}/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$	[88]
$\text{CH}_2\text{O}/\text{NO}_2$	—	УВ	$-d[\text{NO}_2]/dt = k \cdot [\text{Ar}]^{0,4} [\text{HCHO}]^{0,56} [\text{NO}_2]^{0,90}$ , $k = 1,26 \cdot 10^{13} \exp(-26,7/RT)$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[k] = \text{см}^{0,86}/(\text{моль}^{0,86} \cdot \text{с})$	[88]
$\text{CH}_2\text{O}/\text{O}_2$ , медл. р.	$T = 590 \div 650 \text{ K}$ , $p = 200 \div 400 \text{ Торр}$ , $[\text{CH}_2\text{O}] = [\text{O}_2] = 2,63 \cdot 10^{-6}$	Р. ст.	$E = 27,4 \text{ ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$	[89]
$\text{C}_2\text{H}_6/\text{H}_2\text{O}$	$T = 1000 \div 2500 \text{ K}$ , $p = (3,1 \div 6,2) \cdot 10^3 \text{ Торр}$	УВ	$dx/dt = k \cdot [\text{H}_2\text{O}]$ , $\lg k = 7,80 \div 8,250/T_f$ , $x$ — доля CO по углероду от начального количества углерода, $T_f$ — конечная температура реакции, $E = 38 \text{ ккал/моль}$ , $[W] = 1/(\text{атм} \cdot \text{с})$	[63]

1	2	3	4	5
$C_2H_6/O_2$	$T = 1500 \div 1723$ К, $p = 0,083$ и $0,054$ атм, $\Phi = 0,67 \div 1,0$	Пламя	Расход CO и образование $CO_2$ в послепламенной области: $-d[CO]/dt = d[CO_2]/dt = k_{общ} [CO]$ . В работе даны выражения для $k_{общ}$ при различных $\Phi$	[90]
$C_2H_6/O_2$	—	УВ	$\tau = A \exp(34,2/RT) \cdot [C_2H_6]^{0,46} [O_2]^{-1,26}$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/см <sup>3</sup> , $[\tau] = c^{-1}$	[70]
$C_2H_6/O_2$	$T = 1120 \div 2000$ К, $p = 0,2 \div 8$ атм, $[C_2H_6] = 0,5 \div 6$ %, $[O_2] = 1 \div 19,7$ %	УВ	$\tau = 1,64 \cdot 10^{-12} \exp(1570/T) \cdot [C_2H_6]^{0,33} [O_2]^{-1,19} [Ип]^{0,37}$ , $Ип - N_2$ или $Ar$ , [моль, см, с]	[91]
$C_2H_6/O_2$	—	Пламя	$E = 39,0$ ккал/моль	[30]
$C_2H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,1 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_6]^{0,1} [O_2]^{1,65}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_2H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,3 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_6]^{0,1} [O_2]^{1,65}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_2H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 2,0 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_6]^{0,1} [O_2]^{1,65}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_2H_6N_2$	$p = 1$ атм	—	$CH_3NNCH_3 \rightarrow N_2 + C_2H_6$ , $A = 10^{14} c^{-1}$ , $E = 50$ ккал/моль, $n = 1$	[32]
$C_2H_4/Ar$	$T = 1120 \div 1560$ К	УВ	$-d[C_2H_4]/dt = k \cdot [C_2H_4]^{0,8} [Ar]^{0,6}$	[92]
$C_2H_4/H_2O$	$T = 1000 \div 2500$ К, $p = (3,1 \div 6,2) \cdot 10^3$ Торр	УВ	$dx/dt = k \cdot [H_2O]$ , $\lg k = 7,80 - 8,250/T_f$ , $x$ — доля CO по углероду от начального количества углерода, $T_f$ — конечная температура реакции, $E = 38$ ккал/моль, $[W] = 1/(\text{атм} \cdot \text{с})$	[63]
$C_2H_4/O_2$	$T = 1500 - 1723$ К, $p = 0,083$ и $0,054$ атм, $\Phi = 0,67 \div 1,0$	Пламя	Расход CO и образование $CO_2$ в послепламенной области: $-d[CO]/dt = d[CO_2]/dt = k_{общ} [CO]$ . В работе даны выражения для $k_{общ}$ для различных $\Phi$	[90]
$C_2H_4/O_2$	$T = 1100 \div 2200$ К, бедные смеси	УВ	$\lg \{ [C_2H_4]^{2/3} [O_2]^{1/3} \cdot \tau \} = -11,00 + 17,9/(4,58T)$ , [моль, с, л, ккал, К]	[22]

$C_2H_4/O_2$	$T = 1120 \div 2000 \text{ К},$ $p = 0,2 \div 4 \text{ атм},$ $[C_2H_4] = 0,5 \div 5 \%,$ $[O_2] = 1 \div 15 \%$	УВ	$\tau = 1,22 \cdot 10^{-11} \exp(10250/T) \cdot [C_2H_4]^{0,35} [O_2]^{-0,54} [In]^{-0,56},$ In — $N_2$ или Ar, [моль, см, с]	[91]
$C_2H_4/O_2$	—	Пламя	$E = 36,0 \text{ ккал/моль}$	[30]
$C_2H_4/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 2,0 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_4]^{0,1} [O_2]^{1,65},$ [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_2H_4/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 2,4 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_4]^{0,1} [O_2]^{1,65},$ [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_2H_4/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 4,3 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_4]^{0,1} [O_2]^{1,65},$ [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_2H_4/O_2/Ar_1$	$T = 1058 \div 1876 \text{ К},$ $\Phi = 0,125 \div 2,0$	УВ	$\tau = 10^{11,9} \exp(34,2/RT) \cdot [C_2H_4]^{0,3} [O_2]^{-1,1} [Ar]^{0,4}$	[93]
$C_2H_4/\text{воздух}$	—	УВ	$\lg(\tau[O_2]) = -11,45 + 27500/(4,58T),$ [моль, с, л, кал, К]	[94]
$C_2H_4/\text{воздух}$	$p = 1 \text{ атм}, \Phi = 0,8 \div 1,2$	Пламя	1. $C_2H_4 + 2O_2 \rightarrow 2CO + 2H_2O,$ 2. $2CO + 2H_2O \rightarrow C_2H_4 + 2O_2,$ 3. $CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2,$ 4. $CO_2 \rightarrow CO + 0,5O_2,$ $W_1 = 1,1 \cdot 10^{14} \exp(-40/RT) \cdot [C_2H_4]^{0,1} [O_2]^{1,65},$ $W_2 = 10^{14} \exp(-40/RT) \cdot [CO] [H_2O],$ $W_3 = 2,656 \cdot 10^{14} \exp(-40/RT) \cdot [CO] [H_2O]^{0,5} [O_2]^{0,25},$ $W_4 = 10^9 \exp(-40/RT) \cdot [CO_2],$ (см, моль, с, ккал)	[95]
$C_2H_2/Ar$ , пиролиз	$T = 1500 \div 3100 \text{ К},$ $p = 0,3 \div 7,0 \text{ бар},$ $[c] = (2-20) \cdot 10^{17} \text{ л/см}^3$	УВ	Период индукции появления сажи: $\tau = 10^{-6,38} \exp(11200/T) \cdot [Ar]^{-0,179},$ [с] = = моль/см <sup>3</sup> , [τ] = с <sup>-1</sup>	[96]
$C_2H_2/H_2/Ar$	$T = 1000 \div 1400 \text{ К},$ $[M] = (0,8 \div 3) \cdot 10^{-2}$	УВ	$-d[C_2H_4]/dt = k \cdot [C_2H_2]^{0,46} [H_2]^{0,96} [Ar]^{0,71},$ $k = 1,29 \cdot 10^7 \exp(-26,63/RT),$ [E] = ккал/моль, [c] = моль/л	[92]
$C_2H_2/H_2O$	$T = 1000 \div 2500 \text{ К},$ $p = (3,1 \div 6,2) \cdot 10^3 \text{ Торр}$	УВ	$dx/dt = k \cdot [H_2O],$ $\lg k = 7,80 - 8,250/T_f,$ $x$ — доля CO по углероду от [C], $E = 38 \text{ ккал/моль}, T_f$ — конечная температура реакции, [W] = 1/(атм·с)	[63]



1	2	3	4	5
$C_2H_2/O_2$	$T = 1100 \div 2200$ К, бедные смеси	УВ	$\lg \{ [C_2H_2]^{2/3} [O_2]^{1/3} \cdot \tau \} = -10,81 + 17300/(4,58T)$ , [моль, с, л, ккал, К]	[22]
$C_2H_2/O_2$	—	Пламя	$E = 32,0$ ккал/моль	[30]
$C_2H_2/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 6,5 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_2]^{0,5} [O_2]^{1,25}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_2H_2/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 7,8 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_2]^{0,5} [O_2]^{1,25}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_2H_2/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,2 \cdot 10^{13} \exp(-30,0/RT) [C_2H_2]^{0,5} [O_2]^{1,25}$ , (см, с, моль, ккал)	[9] ***
$C_2H_2/O_2/Kr$	$T = 1700 \div 2000$ К, $p \sim 100$ Торр	УВ	$\lg(\tau \cdot [O_2]) = -11,48 + 17,1/(4,58T)$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/л	[67]
$C_2H_2/O_2/Ar$	$T = 1300 \div 2200$ К	УВ	$\tau = 2,69 \cdot 10^{-11} \exp(71,58/RT) \cdot [O_2]^{-1}$ , $[E] =$ кДж/моль, $[c] =$ моль/л	[97]
$C_2H_5OH/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,5 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_5OH]^{0,15} [O_2]^{1,6}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_2H_5OH/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,8 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_5OH]^{0,15} [O_2]^{1,6}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_2H_5OH/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 3,6 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_2H_5OH]^{0,15} [O_2]^{1,6}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_2H_5NO_2/O_2$	—	УВ	$\tau = A \exp(-30,0/RT) \cdot [C_2H_5NO_2]^{-0,7} [O_2]^x$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/см	[70]
$C_2H_5ONO_2$ , разложение	$p \sim 35$ мм рт. ст.	Пламя, $U_n$ , кинет. теплов.	$W = k[C_2H_5ONO_2] \cdot M$ , При $T < 740$ К: $A = 10^{14} \div 10^{15}$ см <sup>3</sup> /(моль·с), $E = 20 \div 25$ ккал/моль. При $T = 740 \div 800$ : $A = 10^{20,6}$ см <sup>3</sup> /(моль·с), $E = 38$ ккал/моль	[98]
$C_2H_4O$ , разложение окиси этилена	$p = 0,66 \div 0,9$ атм	Пламя	$E = 52,7$ ккал/моль, $k = 1,5 \cdot 10^{13}$ с <sup>-1</sup>	[99]
$C_3H_8$ разложение	—	—	$A = 6,4 \cdot 10^{13}$ с <sup>-1</sup> , $E = 62,1$ ккал/моль, $n = 1$	[100]

$C_3H_8/C_2H_4O/H_2$ , пиролиз	$T = 723 \div 873$ К	Р. ст.	Для добавки 5 % $C_2H_4O$ + 5 % $H_2$ $E = 134$ кДж/моль	[101]
$C_3H_8/O_2$	—	Гор.	Скорость образования NO: $W = 4,02 \cdot 10^{13} T^{-0,675} \exp(-67915/T) \cdot \rho^{1/2} [O_2]^{1/2} \times [N_2]^{1/2}$ , $[W] =$ кг/моль/(кг·с), $\rho$ — плотность	[102]
$C_3H_8/O_2$	—	Пламя	Смешанная модель: $C_nH_m + n/2 O_2 \rightarrow m/2 H_2 + n CO$ , $k = 8,8 \cdot 10^8 T \exp(-12300/T)$ , $[k] =$ см <sup>3/2</sup> /(моль <sup>1/2</sup> ·с)	[69]
$C_3H_8/O_2$	$T = 900 \div 1540$ К, $p = 0,7 \div 29$ атм, $[C_3H_8] = 0,41 \div 10$ % $[O_2] = 21 \div 32,5$ %	УВ	$\tau = 2,8 \cdot 10^{-13} \exp(18400/T) \cdot [C_3H_8]^{0,29} [O_2]^{-1,19} [In]^{0,39}$ , In — $N_2$ или Ar, [моль, см, с]	[91]
$C_3H_8/O_2$	—	Пламя	1'. $C_3H_8 + O_2 + H_2O + 2H \rightarrow 3CO + 6H_2$ , 2'. $CO + H_2O = CO_2 + H_2$ , 3'. $H + H + M = H_2 + M$ , 4'. $O_2 + 3H_2 = 2H_2O + 2H$ . При квазистационарности [H] механизм имеет вид: 1. $C_3H_8 + 2O_2 \rightarrow 3CO + 3H_2 + H_2O$ , 2. $CO + H_2O = CO_2 + H_2$ , 3. $O_2 + 2H_2 = 2H_2O$ . Скорости выражаются через скорости элементарных стадий и приведены в работе	[73, 103]
$C_3H_8/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 8,6 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_3H_8]^{0,1} [O_2]^{1,65}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_3H_8/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,0 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_3H_8]^{0,1} [O_2]^{1,65}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_3H_8/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,5 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_3H_8]^{0,1} [O_2]^{1,65}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_3H_8/O_2/Ar$	$T = 1250 \div 1600$ К, $p = 2 \div 10$ атм, $\Phi = 0,125 \div 2,0$	УВ	$\tau = 4,4 \cdot 10^{-14} \exp(42,2/RT) \cdot [C_3H_8]^{0,57} [O_2]^{-1,22} [Ar]^0$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ см <sup>3</sup> /(моль·с)	[104]
$C_3H_8/O_2/N_2$	Стехиом. смесь с воздухом	Пламя	$A = 3,3 \cdot 10^9$ с <sup>-1</sup> , $E = 38$ ккал/моль, $n = 1$	[105]

1	2	3	4	5
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> /воздух	$T = 1400 \div 1900 \text{ K}$ , $p = 0,13 \div 0,78 \text{ атм}$ , $\Phi = 0,5 \div 0,95$	Р. см.	$-d[\text{CO}_2]/dt = 2,9 \cdot 10^{10} \exp(-15/RT) \cdot f_{\text{CO}}^{0,35} f_{\text{O}_2}^{0,4} f_{\text{H}_2\text{O}} S$ , $S = (p/RT)^{1,75}$ , $[E] =$ $= \text{ккал/моль}$ , $f_i$ — мольные доли, $[p] = \text{атм}$ , $[W] = \text{моль}/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$	[61]
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> /воздух	$T = 998 \div 1123 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Р. пр.	$\tau = A \cdot \exp(47/RT) \cdot [\text{O}_2]^{-0,74}$ при $[\text{O}_2] = 30 \%$ по весу; при $[\text{O}_2] = 12,5 \%$ по весу $E = 50 \text{ ккал/моль}$	[106]
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> /воздух	$p \sim 1 \text{ атм}$ , $\Phi = 0,8 \div 1,2$	Пламя	1. $\text{C}_3\text{H}_8 + (7/2)\text{O}_2 \rightarrow 3\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$ , 2. $3\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_8 + (7/2)\text{O}_2$ , 3. $\text{CO} + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ , 4. $\text{CO}_2 \rightarrow \text{CO} + 0,5\text{O}_2$ , $W_1 = 2,4 \cdot 10^{12} \exp(-30/RT) \cdot [\text{C}_3\text{H}_8]^{0,1} [\text{O}_2]^{1,65}$ , $W_2 = 10^{12} \exp(-30/RT) \cdot [\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]$ , $W_3 = 2,656 \cdot 10^{14} \exp(-40/RT) \cdot [\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}]^{0,5} [\text{O}_2]^{0,25}$ , $W_4 = 10^9 \exp(-40/RT) \cdot [\text{CO}_2]$ , (см, моль, с, ккал)	[95]
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> /воздух	—	Пламя	$E = 39 \text{ ккал/моль}$ , $n = 1$	[80]
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> /воздух	$T_0 = 573 \div 873 \text{ K}$ , $\Phi = 0,45 \div 0,625$	Р. пр., гор.	1. $\text{C}_3\text{H}_8 + (7/2)\text{O}_2 \rightarrow 3\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$ , 2. $\text{CO} + (1/2)\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ , $d[\text{C}_3\text{H}_8]/dt = 4,97 \cdot \exp(-9,195/RT) \cdot [\text{C}_3\text{H}_8]^{0,5}$ , $d[\text{C}_3\text{H}_8]/dt = 1,3 \cdot 10^{14} \exp(-30,0/RT) \cdot [\text{CO}] [\text{O}_2]^{0,5} [\text{H}_2\text{O}]^{0,5}$ . Скорость образования NO: $d[\text{NO}]/dt = 2k_9 k_{12} k_{13} [\text{N}_2] [\text{CO}] [\text{O}_2] / [\text{CO}_2]$ (см. ссылку). $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль}/\text{см}^3$	[107]
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> /воздух	—	Пламя	$d[\text{C}_3\text{H}_8]/dt = -4,2 \cdot 10^{11} \exp(-61500/RT) \cdot [\text{C}_3\text{H}_8]$ , $[E] = \text{кДж/кмоль}$	[26]
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> Cl/Cl <sub>2</sub>	$T = 450 \div 550 \text{ K}$ , $p = 1 \text{ атм}$	Р. пр.	1. $\text{Cl} + \text{C}_3\text{H}_7\text{Cl} \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6\text{Cl} + \text{HCl}$ , 2. $\text{C}_3\text{H}_6\text{Cl} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6\text{Cl}_2 + \text{Cl}$ . Начальная скорость: $-d[\text{Cl}_2]/dt = k \cdot K_{\text{Cl}_2} \cdot [\text{C}_3\text{H}_7\text{Cl}] [\text{Cl}_2]^{0,5}$ , $k \cdot K_{\text{Cl}_2} = 9,2 \times$ $\times 10^{13} \exp(-14980/T) \text{ см}^3/2 \cdot \text{моль}^{-1/2} \cdot \text{с}^{-1}$	[108]

$C_3H_4/NO_2$ , пропиен	$T = 443 \div 493$ К, $p = 50 \div 300$ Торр	Р. ст.	Начальная скорость: $-d[NO_2]/dt = 10^{8,67} \exp(-12,77/RT) \cdot [C_3H_4]^{1,03} [NO_2]^{0,93}$ , $[E] =$ ккал/моль, $[W] =$ моль/(см <sup>3</sup> ·с)	[109]
$C_3H_6/O_2$	$T = 1210 \div 1490$ К, $[M] = (2,8 \div 5,6) \cdot 10^{-5}$	—	$\tau = 1,56 \cdot 10^{-16} \exp(36,3/RT) \cdot [C_3H_6]^{-0,12} [O_2]^{-1,1} [Ar]^0$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/см <sup>3</sup>	[70]
$C_3H_6/O_2$	$T = 1200 \div 1936$ К, $p = 2,1 \div 7$ атм, $[C_3H_6] = 0,8 \div 6$ %, $[O_2] = 2,7 \div 19$ %	УВ	$\tau = 1,51 \cdot 10^{-12} \exp(17\,390/T) \cdot [C_3H_6]^{-0,12} [O_2]^{-1,12} [In]^{1,51}$ , In — N <sub>2</sub> или Ar, [моль, см, с]	[91]
$C_3H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 4,2 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_3H_6]^{-0,1} [O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_3H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 5,0 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_3H_6]^{-0,1} [O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_3H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 8,0 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_3H_6]^{-0,1} [O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_3H_6N_2F_4$	$T = 670 \div 700$ К, $p = 15 \div 150$ Торр	Предел самовос.	$E = 42,5$ ккал/моль, $(F_2N)CH_2-CH_2-CH_2(NF_2)$ .	[110]
$C_3H_5NO_2/O_2$	$T = 940 \div 1160$ К, $[M] =$ $= (1,7 \div 2,4) \cdot 10^{-5}$	УВ	$\tau = k \cdot [C_3H_5NO_2]^{-0,56} [O_2]^{-0,23}$ , $k = 1,16 \cdot 10^{-15} \exp(31/RT)$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/см <sup>3</sup> , $[\tau] =$ с <sup>-1</sup>	[70]
$C_3O_2/O_2$	$T = 833 \div 953$ К, $p = 20 \div 200$ Торр, $1C_3O_2 : 2O_2$	Р. ст.	$C_3O_2 + 2O_2 \rightarrow 2CO + CO_2 + O_2$ , $-d[C_3O_2]/dt = k \cdot [C_3O_2]^2 [O_2]^{0,5}$ , при $T = 926$ К $k = 10^{13}$ , $E = 28$ ккал/моль, $[k] =$ л <sup>3/2</sup> /(моль <sup>3/2</sup> ·с). Предел самовоспламенения, медл. реакция	[51]
$C_4H_{10}/H_2O$	$T = 1000 \div 2000$ К, $p = (3,1 \div 6,2) \cdot 10^3$ Торр	УВ	$dx/dt = k \cdot [H_2O]$ , $\lg k = 7,80 - 8,250/T_f$ , $x$ — доля СО по углероду от начального количества углерода, $T_f$ — конечная температура реакции, $E = 38$ ккал/моль, $[W] = 1/(\text{атм} \cdot \text{с})$	[63]
$C_4H_{10}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 7,4 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_4H_{10}]^{0,15} [O_2]^{1,6}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_4H_{10}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 8,8 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_4H_{10}]^{0,15} [O_2]^{1,6}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **

1	2	3	4	5
$C_4H_{10}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,3 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_4H_{10}]^{0,15} [O_2]^{1,6}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
<i>n</i> - $C_4H_{10}/O_2$	$T = 600 \div 700$ К, $p = 1$ атм	Р. пр.	В предположении схемы: 1. $C_4H_{10} + 2O_2 \rightarrow 2CH_2O + (1/2)CH_3COOH + CH_3OH$ , 2. $CH_2O + (1/4)CH_3COOH + (3/4)O_2 \rightarrow (3/2)CO + (3/2)H_2O$ , 3. $C_4H_{10} + 4O_2 \rightarrow 2CO + 4H_2O + (1/2)C_2H_4 + CO_2$ , $W_1 = 7,23 \cdot 10^{15} \exp(-205/RT) \cdot [C_4H_{10}] [O_2]^{0,5}$ , $W_2 = 5,97 \cdot 10^{16} \exp(-202/RT) \cdot [R] [O_2]^{0,5}$ , $W_3 = 8,47 \cdot 10^{22} \exp(-279/RT) \cdot [C_4H_{10}] [O_2]^{0,5}$ , $[R] = 0,8[CH_2O] + 0,2[CH_3COOH]$ , [кДж, моль, м, с]	[111]
<i>n</i> - $C_4H_{10}/O_2/N_2$	—	Пламя	$E = 33$ ккал/моль. В работе приведена корреляция между $E$ и энергией самой слабой связи C—H в соединении	[30]
<i>изо</i> - $C_4H_{10}/O_2/N_2$	—	Пламя	$E = 31$ ккал/моль	[30]
$C_4H_6/NO_2$ , бутин-2	$T = 443 \div 493$ К, $p = 50 \div 300$ Торр	Р. ст.	Начальная скорость: $-d[NO_2]/dt = 10^{8,56} \exp(-11,98/RT) [C_4H_6]^{1,03} \times [NO_2]^{1,01}$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/см <sup>3</sup>	[109]
$C_4H_{12}Sn$ , разложение, тетраметилолово	$T = 613 \div 683$ К, $p = 5700 \div 10\ 600$ Па	Р. ст.	$\ln k = 10,6 - 11,56 \cdot 10^3/T$ , $n = 1$ до степени превращения 80 %, $[k] = c^{-1}$	[112]
$C_4H_{12}Sn/O_2$ , автоокисление	$T = 613 \div 683$ К, $p = 4 \cdot 10^3 \div 10^4$ Па	Р. ст.	$-d[C_4H_{12}Sn]/dt = k \cdot [C_4H_{12}Sn]([C_4H_{12}Sn]_0 - [C_4H_{12}Sn])$ , $\ln k = 21,4 - 17,2 \times 10^3/T$ , $[k] = c^{-1}$	[112]
$C_4H_{10}O/O_2$ , дивтилэфир	—	Пламя	$E = 38,5$ ккал/моль	[30]
$C_4H_8N_2F_4$ , $CH_3-$ $-CH(NF_2)-$ $-CH(NF_2)-CH_3$	$T = 666 \div 685$ К, $p = 7 \div 200$ Торр	—	$E = 50$ ккал/моль. Предел самовоспламенения	[110]
$C_4H_4O/O_2$ , фуран	$T = 770 \div 1400$ К, $p = 0,5 \div 12$ атм	Р. ст., УВ	$\tau = 1,52 \cdot 10^{-17} \exp(31,57/RT) \cdot [C_4H_4O]^{-1,66} [O_2]^{0,29}$ , $[E] =$ ккал/моль, $[c] =$ моль/см <sup>3</sup>	[113]

$C_5H_{12}/\text{воздух}$	—	Пламя	$E = 146 \text{ кДж/моль}$	[26]
$C_5H_{12}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 6,4 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_5H_{12}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_5H_{12}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 7,8 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_5H_{12}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_5H_{12}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,2 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_5H_{12}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
<i>n</i> - $C_5H_{12}$ , пиролиз	$T = 653 \div 773 \text{ К}$ , $p = 9,7 \div 12,1 \text{ кПа}$	Р. ст.	Начальная скорость: $-d[C_5H_{12}]/dt = k \cdot [C_5H_{12}]^{3/2}$ , $\lg k = 9,66 - 217,73/(2,3RT)$ , $[E] = \text{кДж/моль}$ , $[k] = \text{л}^{3/2}/(\text{моль}^{1/2} \cdot \text{с})$	[114]
<i>изо</i> - $C_5H_{12}$	$T = 1123 \div 1373 \text{ К}$	—	$-d[C_5H_{12}]/dt = k \cdot [C_5H_{12}]$	[115]
<i>нео</i> - $C_5H_{12}$ , пиролиз	$T = 602 \div 801 \text{ К}$ , $p = 5,7 \div 44,1 \text{ кПа}$	Р. ст.	Начальная скорость: $-d[C_5H_{12}]/dt = k \cdot [C_5H_{12}]^{3/2}$ , $\lg k = 14,65 - 255,96/(2,3RT)$ , $[E] = \text{кДж/моль}$ , $[k] = \text{л}^{3/2}/(\text{моль}^{1/2} \cdot \text{с})$	[114]
<i>нео</i> - $C_5H_{12}/O_2/N_2$	—	Пламя	$E = 38 \text{ ккал/моль}$	[30]
<i>нео</i> - $C_5H_{12}$	$T = 663 \div 766 \text{ К}$ , $p = 8 \div 26,7 \text{ кПа}$	Р. ст.	Начальная скорость: $-d[C_5H_{12}]/dt = k \cdot [C_5H_{12}]^{3/2}$ , $\lg k = 11,92 - 213,26/(2,3RT)$ , $d[CH_4]/dt = k \cdot [C_5H_{12}]^{3/2}$ , $\lg k = 12,21 - 217,7/(2,3RT)$ , $[E] = \text{кДж/моль}$ , $[k] = \text{л}^{3/2}/(\text{моль}^{1/2} \cdot \text{с})$ .	[114]
$C_5H_6O/O_2$ , сильван	$T = 770 \div 1400 \text{ К}$ , $p = 0,5 \div 12 \text{ атм}$	Р. ст., УВ	$\tau = 4,67 \cdot 10^{-16} \exp(41,83/RT) \cdot [C_5H_6O]^{-0,55} [O_2]^{-0,24}$ , $[E] = \text{ккал/моль}$ , $[c] = \text{моль/см}^3$	[113]
$C_6H_{14}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 5,7 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_6H_{14}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_6H_{14}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 7,0 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_6H_{14}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_6H_{14}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,1 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT) [C_6H_{14}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_6H_6/Ne$ , пиролиз	$T = 1400 \div 2200 \text{ К}$ , $[M] = (2,2 \div 2,9) \times 10^{-8} \text{ моль/см}^3$ , $[C_6H_6] = 2,1 \% \text{ и } 5 \% \text{ в Ne}$	УВ	Начальная скорость. $k = 10^{14,81} \exp(-34,33/RT) \text{ см}^3/(\text{моль} \cdot \text{с})$ , $n = 2$ , $[E] = \text{ккал/моль}$	[116]

1	2	3	4	5
$C_6H_6/O_2$	—	Пламя	$E = 40$ ккал/моль	[30]
$C_6H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 2,0 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_6H_6]^{-0,1}[O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_6H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 2,4 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_6H_6]^{-0,1}[O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_6H_6/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 4,3 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_6H_6]^{-0,1}[O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_7H_{16}/O_2$	$T = 600 \div 1500$ К, $p = 1 \div 40$ атм	Мод., за- держка са- мовоспла- менения	1. $F \rightarrow x$ , 2. $x + 11O_2 \rightarrow P$ , 3. $F + 2O_2 = I$ , 4. $I + 9O_2 \rightarrow P$ ; $F = n - C_7H_{16}$ , $x = 3C_2H_4 + CH_3 + H$ , $I = OC_7H_{13}O_2H + H_2O$ , $P = 7CO_2 + 8H_2O$ , $k_1 = 2 \cdot 10^{10} \exp(-21650/T) \text{ с}^{-1}$ , $k_2 = (p/RT) \cdot 2 \cdot 10^{12} \exp(-E_2/T)$ , $k_{3f} = (p/RT) \cdot 3 \cdot 10^{18} \exp(-E_{3f}/T)$ , $k_{3b} =$ $= (p/RT) \cdot 4 \cdot 10^{22} \exp(-37285/T)$ , $k_4 = (p/RT) \cdot 5 \cdot 10^{13} \exp(-13230/T)$ (см <sup>3</sup> /моль × с), $E_1 = E_{3f} = 3E_2$ . Запись кинетических уравнений: стехиометрические коэффициенты в соответствии со схемой, порядки реакций по реагентам равны 1	[117]
$C_7H_{16}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 5,1 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_7H_{16}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_7H_{16}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 6,3 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_7H_{16}]^{0,25}[O_2]^{0,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_7H_{16}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 4,0 \cdot 10^{12} \exp(-30,0/RT)[C_7H_{16}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_7H_8/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,6 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_7H_8]^{-0,1}[O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_7H_8/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,9 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_7H_8]^{-0,1}[O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_7H_8/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 3,4 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_7H_8]^{-0,1}[O_2]^{1,85}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_8H_{18}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 4,6 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_8H_{18}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_8H_{18}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 7,2 \cdot 10^{12} \exp(-40,0/RT)[C_8H_{18}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *

$C_8H_{18}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 5,7 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_8H_{18}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_8H_{18}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 9,6 \cdot 10^{12} \exp(-40,0/RT)[C_8H_{18}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_8H_{18}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 9,4 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_8H_{18}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_8H_{18}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 1,5 \cdot 10^{13} \exp(-40,0/RT)[C_8H_{18}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_9H_{20}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 4,2 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_9H_{20}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_9H_{20}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 5,2 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_9H_{20}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_9H_{20}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 8,8 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT)[C_9H_{20}]^{0,25}[O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_{10}H_{20}/O_2$ , керосин	—	Гор.	$C_{10}H_{20} + 15O_2 \rightarrow 10CO_2 + 10H_2O$ , $-d[C_{10}H_{20}]/dt = 2,4 \cdot 10^7 \exp(-4630/T) \cdot [C_{10}H_{20}]^{1,5}[O_2]$	[118]
Керосин/ $O_2$	$T = 1000 \div 1450$ К, [керосин] = $0,4 \div 1,2$ % массов. долей [ $O_2$ ] = $4,5 \div 3,8$ % массов. долей	Р.пр., адиаб.	Оценка константы: $A = 1,2 \cdot 10^{12}$ , $E = 54$ ккал/моль, $n_K = 0,7$ , $n_{O_2} = 0,7$ . При введении паров калия: $A = 0,42 \cdot 10^{12}$ , $E = 54$ ккал/моль. При $Q_K = 10\ 500$ ккал/кг (керосина) весовой стех. коэф.— 3,4, [A] = $(M^3/кг)^{0,4}c^{-1}$	[119]
$C_{10}H_{20}/O_2$	$T = 840 \div 2360$ К	Гор.	$C_{10}H_{20} + 15O_2 \rightarrow 10CO_2 + 10H_2O$ , $CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$ , $H_2 + 0,5O_2 \rightarrow H_2O$ , $-d[C_{10}H_{20}]/dt = 1,2 \cdot 10^6 \exp(-4630/T) \cdot [C_{10}H_{20}]^{0,5}[O_2]$ , $-d[CO]/dt = 1,3 \cdot 10^{14} \exp(-45\ 100/T)[O_2]^{0,5}[H_2O]^{0,5}[CO]$ , $d[H_2O]/dt = (8[H_2]/[CO]) \cdot (d[CO_2]/dt)$ , [ккал, моль, с, см]	[120] [121] [16] [122]



Окончание табл. 1

1	2	3	4	5
$C_{10}H_{22}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 3,8 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_{10}H_{22}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] *
$C_{10}H_{22}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 4,7 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_{10}H_{22}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] **
$C_{10}H_{22}/O_2$	—	Пламя, мод.	$W = 8,0 \cdot 10^{11} \exp(-30,0/RT) [C_{10}H_{22}]^{0,25} [O_2]^{1,5}$ , [см, с, моль, ккал]	[9] ***
$C_{15}H_{30}/O_2$ , газойль	—	Гор.	1. $C_{15}H_{30} + 7,5O_2 \rightarrow 15CO + 15H_2$ , 2. $CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$ , 3. $H_2 + 0,5O_2 \rightarrow H_2O$ , $-d[C_{15}H_{30}]/dt = 1,2 \cdot 10^6 \exp(-9,195/RT) \cdot [C_{15}H_{30}]^{0,5} [O_2]$ , $-d[CO]/dt = 1,3 \cdot 10^{14} \exp(-30/RT) \cdot [O_2]^{0,5} [CO][H_2O]^{1,5}$ , $d[H_2O]/dt = (8[H_2]/[CO]) \cdot (d[CO_2]/dt)$ , [ккал, моль, с, см]	[123] [16, 124, 122]
Светильный газ	—	Пламя	$E = 155\,000$ кДж/кмоль	[26]

\* Одностадийный процесс:  $Fuel + n_1O_2 \rightarrow n_2CO_2 + n_3H_2O$ ,  $k = A \cdot T^n \exp(-E/RT) [Fuel]^a [O_2]^b$ .

\*\* Двухстадийный процесс: а.  $C_nH_m + (n/2 + m/4)O_2 = nCO + (m/2)H_2O$ ; б.  $CO + (1/2)O_2 = CO_2$ ,  $k_a = A \cdot T^n \exp(-E/RT) [Fuel]^a [O_2]^b$ ,  $k_b = 10^{14,6} \exp(-40/RT) [CO][H_2O]^{0,5} \times [O_2]^{0,25}$ .

\*\*\* Смешанная модель: а.  $C_nH_{2m} + (n/2)O_2 = nCO + mH_2O$ ; б. 21-стадийный механизм для системы  $H_2-O_2-CO$ .

1. Значительно выросли возможности теории в предсказании различных характеристик процессов горения. Получены более точные асимптотические соотношения для определения нормальной скорости горения, предела теплового взрыва и др. Разработаны методы их определения для двух- и трехстадийных моделей.

2. Роль численного моделирования с учетом детальной кинетики также существенно увеличилась. Разработаны детальные кинетические модели для горения многих углеводородных топлив. Это позволяет использовать для определения глобальных параметров результаты исследований на их основе.

3. Разрабатываются методы упрощения и свертки больших кинетических схем и получения более кинетически обоснованных глобальных параметров.

Для адекватного описания кинетики не всегда возможно представление реакции в виде одностадийного процесса. В частности, применение глобальной модели, как правило, приводит к переоценке конечной температуры горения. Использование двухстадийных моделей также связано с необходимостью более точного определения периода индукции при воспламенении топлив [2, 8]. В этом случае разрабатываются так называемые квазиглобальные схемы (semiglobal). Кинетическая схема процесса представляется в виде двух или более брутто-стадий.

Применяются также «смешанные» кинетические модели (quasiglobal), которые состоят из совокупности элементарных стадий и одной или нескольких суммарных (брутто) стадий. Например, для горения сложных углеводородных топлив в [9] предложена модель, включающая брутто-стадии окисления и пиролиза углеводорода до CO и H<sub>2</sub>. Дальнейшее реагирование представлено набором элементарных стадий.

**Основные методы получения глобальных кинетических параметров.** Эффективные кинетические параметры реакций горения получают из анализа следующих процессов горения:

1. Ламинарное пламя предвременно перемешанной смеси. Для получения глобальных параметров используются зависимости нормальной скорости от температуры, давления и состава, а также температурный и концентрационные профили.

2. Воспламенение. Используются зависимости задержек воспламенения от температуры, давления и состава, временная зависимость температурного хода и кинетические кривые основных реагентов, а также сведения о положении пределов самовоспламенения.

3. Исследование кинетики процесса в высокотемпературных проточных реакторах различного вида.

При решении обратной задачи нахождения брутто-параметров применяются три подхода. В первом случае исходными являются экспериментальные данные. Их можно обработать с привлечением каких-либо аналитических формул для соответствующих характеристик (скорость ламинарного пламени, предел теплового взрыва и т. д.) [7]. В настоящее время используются также полные численные модели соответствующих процессов горения, в которых в качестве неизвестных выступают глобальные параметры.

Как уже отмечалось, исходным материалом для обработки могут служить данные численных расчетов моделей с детальным кинетическим описанием. Основанием для этого служит хорошее соответствие расчетов эксперименту. Это и есть второй подход: получение глобальной кинетики из детального кинетического описания.

Третий путь — последовательное сокращение детальной схемы до квазиглобальной [10, 11 и др.]. В данном случае глобальные параметры выражаются через кинетические параметры элементарных стадий детальной модели. Применяется следующая технология редуцирования. Вначале производится сокращение схемы до упрощенной с выделением важных стадий. На этом этапе часто приходится делать дополнительные упрощения, что приводит к огрублению схемы. Дальнейшая процедура

Система	Давление, температура, состав	Тип и характеристика процесса	Кинетические данные. Обобщенные механизмы	Литература
$C_nH_{2n+n}/O_2$	$T = 960 \div 1540$ К, $p = 1 \div 9$ атм, $\Phi = 0,12 \div 2,0$	Р. пр.	<p>Окисление парафинов. Основывается на данных для пропана. Изменением на 20 % предэкспоненциального множителя стадии 1 модель описывает окисление бутана, 2- и 3-метилпентана и <i>n</i>-октана.</p> <p>1. <math>C_nH_{2n+2} \rightarrow (n/2)C_2H_4 + H_2</math>, 2. <math>C_2H_4 + O_2 \rightarrow 2CO + H_2</math>, 3. <math>CO + 1/2O_2 \rightarrow CO_2</math>, 4. <math>H_2 + 1/2O_2 \rightarrow H_2O</math>,</p> <p><math>-d[C_nH_{2n+2}]/dt = k_1[C_nH_{2n+2}]^{0,5}[O_2]^{1,07}[C_2H_4]^{0,4}</math>, <math>-d[C_2H_4]/dt = k_2[C_2H_4]^{0,9}[O_2]^{1,18} \times</math> <math>\times [C_nH_{2n+2}]^{-0,37}</math>, <math>-d[CO]/dt = k_3[CO][O_2]^{0,25}[H_2O]^{0,5} \cdot 7,93 \cdot \exp(-2,48\Phi)</math>, <math>-d[H_2]/dt =</math> <math>= k_4[H_2]^{0,85}[O_2]^{1,42}[C_2H_4]^{-0,56}</math>, <math>\Phi</math> — начальное соотношение реагентов, <math>k_1 = 10^{17,32} \times</math> <math>\times \exp(-49,6/RT)</math>, <math>k_2 = 10^{14,7} \exp(-50,0/RT)</math>, <math>k_3 = 10^{14,6} \exp(-40,0/RT)</math>, <math>k_4 = 10^{13,52} \times</math> <math>\times \exp(-41,0/RT)</math>, <math>[k] = \text{моль}^2/(\text{см}^3 \cdot \text{с})</math></p>	[3]
$C_nH_{2n+2}/O_2^{-1}$	—	Пламя	<p>1. <math>C_nH_{2n+2} + (n/2)O_2 \rightarrow nCO + (n+1)H_2</math>, 2. <math>C_nH_{2n+2} + nH_2O \rightarrow nCO + (2n+1)H_2</math>, 3. <math>H_2 + 1/2O_2 = H_2O</math>, 4. <math>CO + H_2O = CO_2 + H_2</math>,</p> <p><math>W_1 = k_1 \cdot [C_nH_{2n+2}]^{1,2}[O_2]^{5,4}</math>, <math>W_2 = k_2 \cdot [C_nH_{2n+2}][H_2O]</math>, <math>W_3 = k_3 \cdot [H_2]^{1/2}[O_2]^{9/4}[H_2O]^{-1}</math>, <math>W_4 = k_4 \cdot [CO][H_2O]</math>.</p> <p>Для бедных смесей: <math>W_3' = k_3' \cdot [H_2]^{1/2}[O_2]^{3/2}</math>. Константы прямых стадий <math>k = A T^b \times</math> <math>\times \exp(-E/RT)</math> для <math>C_1H_4</math>, <math>C_2H_6</math>, <math>C_3H_8</math> и <math>C_4H_{10}</math> приведены в табл. 3. Константы обратных стадий рассчитываются через <math>K_p</math> (см, с, моль, ккал)</p>	[4]
Смесь углеводородов/воздух	—	Гор. УВ, р. пр., предел стабилизации	<p>Смешанная модель. Включает механизм из элементарных стадий для <math>CO</math>, <math>H_2O</math>, <math>H_2O_2</math> и <math>CH_2O</math>, глобальные реакции пиролиза углеводородов до <math>C_2H_2</math> и <math>C_2H_4</math> и их дальнейшие брутто-стадии с <math>OH</math> и <math>CHO</math>. Содержит стадии образования и окисления сажи. Кинетика алифатических компонентов описывается моделью для изооктана, а ароматических для толуола. При этом предлагается использовать те же кинетические параметры. В табл. 4 для глобальных стадий смешанной модели: <math>W = A \cdot T^n \cdot \exp(-E/RT) \cdot [C]^a [O_2]^b [OH]^c \times</math> <math>\times [H]^d</math> (см, моль, с)</p>	[124]

заключается в последовательном применении принципа квазистационарных концентраций, принципа частичного равновесия и линейных преобразований с комбинациями скоростей стадий. В ряде случаев это позволяет прийти к небольшому набору глобальных стадий с константами скоростей, зависящими от исходных констант.

**Ограниченность глобальных параметров.** Глобальная модель — это аппроксимация описания кинетики протекания реакции и по своей сути она является «подготовочной». Ее применение в другом диапазоне начальных параметров, экстраполяция на иной тип процесса (пламя, зажигание) или использование для определения других характеристик (предел, период индукции) могут привести к неверным результатам. Глобальные стадии не независимые, как элементарные.

Численные значения параметров зависят от типа процесса, начальных условий, от характеристики, из которой они извлекались, и брутто-схемы. Составление из отдельных макрокинетических стадий моделей более сложного процесса не гарантирует удовлетворительных результатов. Порядки реакций по отдельным компонентам часто не соответствуют стехиометрии уравнения. Опыт применения глобальных моделей [1, 2, 8] показывает, что одностадийные брутто-модели дают завышенные температуры горения вследствие неучета диссоциации продуктов. Применение суммарных моделей в широком диапазоне концентраций исходных веществ часто приводит к неудовлетворительному описанию процесса в богатой области. Существуют также трудности в прогнозе концентраций промежуточных стабильных веществ, например водорода и окиси углерода для пламени метана [1].

**В табл. 1—4** представлены кинетические параметры для высокотемпературных газофазных реакций. Помимо сведений о скоростях реакций приводятся данные по задержкам воспламенения различных реакционных систем. Отметим, что подборки эффективных кинетических параметров содержатся в [1, 5, 12—14]. В ряде работ проведен обстоятельный анализ макрокинетики отдельных реакций с рекомендациями: горение метана [1, 14], окисление аммиака [15], окисление CO [14, 16]. Основные позиции, приводимые в таблицах, следующие:

- исходная система. Реакция задается перечислением исходных веществ;
- брутто-схема;
- начальные условия (температура, давление, состав);
- кинетические параметры;
- тип процесса (пламя, самовоспламенение и др.) и характеристика (задержка воспламенения и т. д.), из которой извлекались данные;
- библиографическая ссылка.

Используются следующие обозначения: гор.— горение; мод.— моделирование; н. у.— нормальные условия; р. адиаб.— реактор адиабатический; р. пр.— реактор проточный; р. см.— реактор смешения, р. ст.— реактор статический; р. стр.— реактор струевой; р. турб.— реактор турбулентный; самовоспл.— самовоспламенение; т. вз.— тепловой взрыв; УВ — ударная волна; Ф — эквивалентное соотношение реагентов (equivalence ratio);  $A$  — предэкспоненциальный множитель;  $c$  — концентрация;  $E$  — энергия активации;  $f$  — мольная доля;  $k$  — константа скорости;  $K_p$  —

Таблица 3

К	Углеводород	$A$	$b$	$E$
$k_1$	$CH_4$	$0,44 \cdot 10^{12}$	0	30
	$C_2H_6$	$0,42 \cdot 10^{12}$		
	$C_3H_8$	$0,40 \cdot 10^{12}$		
	$C_4H_{10}$	$0,38 \cdot 10^{12}$		
$k_2$	$CH_4-C_4H_{10}$	$0,30 \cdot 10^9$	0	30
$k_4$	$CH_4-C_4H_{10}$	$0,275 \cdot 10^{10}$	0	20
$k_2$	$CH_4$	$0,25 \cdot 10^{17}$	-1	40
	$C_2H_6$	$0,35 \cdot 10^{17}$		
	$C_3H_8$	$0,30 \cdot 10^{17}$		
	$C_4H_{10}$	$0,28 \cdot 10^{17}$		
$k_3'$	$CH_4$	$0,68 \cdot 10^{16}$	-1	40
	$C_2H_6$	$0,90 \cdot 10^{16}$		
	$C_3H_8$	$0,85 \cdot 10^{16}$		
	$C_4H_{10}$	$0,75 \cdot 10^{16}$		

Таблица 4

Модель	Реакция	A	n	E/R	a	b	c	d
Толуол	$C_7H_8 \rightarrow 3,5C_2H_2 + 0,5H_2,$	$1,86 \cdot 10^{10}$	0	$3,5 \cdot 10^4$	1	0	0	0
	$C_7H_8 + 3,5O_2 \rightarrow 7CO + 4H_2,$	$4,50 \cdot 10^9$	1	$2,68 \cdot 10^4$	0,5	1	0	0
	$C_7H_8 + OH \rightarrow 3,25C_2H_2 + 0,5CO +$ $+ 0,5H_2O + 0,75H_2$	$1,47 \cdot 10^{17}$	0	$1,45 \cdot 10^4$	1	0	1	0
Изооктан	$C_8H_{18} \rightarrow 4C_2H_4 + H_2,$	$1,05 \cdot 10^{12}$	0	$3,52 \cdot 10^3$	1	0	0	0
	$C_8H_{18} + 4O_2 \rightarrow 8CO + 9H_2,$	$1,29 \cdot 10^9$	1	$2,52 \cdot 10^4$	0,5	1	0	0
	$C_8H_{18} + OH \rightarrow 3,75C_2H_4 + 0,5CO +$ $+ 0,5H_2O + 1,5H_2$	$2,00 \cdot 10^{17}$	0	$1,49 \cdot 10^4$	1	0	1	0
Вторичные стадии	$C_2H_2 + 6OH \rightarrow 4H_2O + 2CO,$	$1,79 \cdot 10^{15}$	0	$1,39 \cdot 10^4$	1	0	1	0
	$C_2H_2 + 2OH \rightarrow 2H_2 + 2CO,$	$2,80 \cdot 10^{16}$	0	0	1	0	1,5	0
	$C_2H_4 + 6OH \rightarrow 2H_2O + 2CO + H_2,$	$2,20 \cdot 10^{15}$	0	$1,21 \cdot 10^4$	1	0	1	0
	$C_2H_4 + 2OH \rightarrow 3H_2 + 2CO,$	$2,11 \cdot 10^{27}$	-3	$6,31 \cdot 10^3$	1	0	1,5	0
	$C_2H_2 + O_2 = 2CHO,$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,41 \cdot 10^4$	1	1	0	0
	$C_2H_4 + H = C_2H_2 + H_2 + H$	$2,09 \cdot 10^{17}$	0	$3,98 \cdot 10^4$	1	0	0	1

константа равновесия;  $M$  — общая концентрация смеси;  $n$  — общий порядок реакции;  $U_n$  — нормальная скорость;  $W$  — скорость реакции;  $\tau$  — период индукции (задержки воспламенения). Размерности величин указаны в таблицах. Температура приведена в градусах Кельвина.

В обработке данных принял участие В. Н. Бухаров. Работа проводилась в рамках программы создания банка кинетической информации.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Abdalla A. Y., Bradley D., Chin S. B. et al. Global reaction schemes for hydrocarbon oxidation // Oxid. Commun.— 1983.— 4, N 1—4.— P. 113—130.
2. Bowman C. T. Chemical kinetics models for complex reacting flows // Ber. Bunsenges. Phys. Chem.— 1986.— 90, N 11.— P. 943—940.
3. Hautman D. J., Dryer F. L., Schug K. P. et al. A multiple-step overall kinetic mechanism for oxidation of hydrocarbons // Combust. Sci. Technol.— 1981.— 25.— P. 219—235.
4. Jones W. P., Lindstedt R. P. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion // Combust. Flame.— 1988.— 73.— P. 233—249.
5. Заманский В. М., Борисов А. А. Механизм и промотирование самовоспламенения перспективных топлив.— М.: ВИНТИ (Итоги науки и техники. Кинетика и катализ, т. 19).— 1989.— 160 с.
6. Halstead M. P., Kirsch L. J., Prothero A. et al. A mathematical model for hydrocarbon autoignition at high temperatures // Proc. Roy. Soc. Lond.— 1975.— A346.— P. 515—538.
7. Мержанов А. Г. Неизотермические методы в химической кинетике // ФГВ.— 1973.— 9, № 1.— С. 4—36.
8. Rogers R. C., Chinitz W. Using a global hydrogen — air combustion model in turbulent reacting flow calculations // AIAA J.— 1983.— 21, N 4.— P. 586—592.
9. Westbrook C. K., Dryer F. L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames // Combust. Sci. Technol.— 1981.— 27.— P. 31—43.
10. Peters N. Reducing mechanisms // Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane — air flames: Lecture Notes in Physics, N 384.— Springer-Verlag, 1991.— P. 48—67.
11. Bilger R. W., Starner S. H., Kee R. J. On reduced mechanisms for methane — air combustion in non-premixed flames // Combust. Flame.— 1990.— 80.— P. 135—149.
12. Fenn J., Calcote H. Activation energies in high temperature combustion // 4th Symp. (Int.) on Combust.— 1952.— P. 231—239.
13. Виленский Т. В., Хзмалин Д. М. Динамика горения пылевидного топлива.— М.: Энергия, 1978.— 248 с.
14. Щетников Е. С. Физика горения газов.— М.: Наука, 1965.— 740 с.
15. Branch M. C., Sawyer R. F. Ammonia oxidation in arc-heated flow reactor // 14th Symp. (Int.) on Combust.— 1973.— P. 967—974.

16. Howard J. B., Williams G. C., Fine D. H. Kinetics of carbon monoxide oxidation in postflame gases // *Ibid.*— P. 975—986.
17. Coffee T. P., Kotlar A. J., Miller M. S. The overall reaction concept in premixed laminar steady-state flames. 1. Stoichiometries // *Combust. Flame.*— 1983.— 54.— P. 155—169.
18. Coffee T. P., Kotlar A. J., Miller M. S. The overall reaction concept in premixed laminar steady-state flames. 2. Initial temperatures and pressures // *Ibid.*— 1984.— 58.— P. 59—67.
19. Meyer J. W., Oppenheim A. K. On the shock-induced ignition of explosive gases // 13th Symp. (Int.) on Combust.— 1971.— P. 1153—1164.
20. White D. R., Moore G. E. Structure of gaseous detonation. 4. Induction zone studies in H<sub>2</sub>—O<sub>2</sub> and CO—O<sub>2</sub> mixtures // 10th Symp. (Int.) on Combust.— 1965.— P. 785—795.
21. Schott G. L., Kinsey J. L. Kinetic studies of hydroxyl radicals in shock waves. II. Induction times in the hydrogen—oxygen reaction // *J. Chem. Phys.*— 1958.— 29.— P. 1177—1182.
22. White D. R. Density induction times in very lean mixtures of D<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, and C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> with O<sub>2</sub> // 11th Symp. (Int.) on Combust.— 1967.— P. 147—154.
23. Sawyer R. F., Glassman I. The reactions of hydrogen with nitrogen dioxide, oxygen and mixtures of oxygen and nitric oxide // 12th Symp. (Int.) on Combust.— 1969.— P. 469—479.
24. Lezberg E., Lancashire R. Combustion and propulsion // 4th AGARD Coloq.— Pergamon Pr., 1961.— P. 286.
25. Marathe A. G., Mukunda M. S., Jain V. K. Some studies on hydrogen—oxygen diffusion flame // *Combust. Sci. Technol.*— 1977.— 15.— P. 49—64.
26. Померанцев В. В., Арефьев К. М., Ахмедов Д. Б. и др. Основы практической теории горения.— Л.: Энергоатомиздат, 1986.— 312 с.
27. Kaloidas V., Parayannakos N. Kinetics of thermal noncatalytic decomposition of hydrogen sulfide // *Chem. Eng. Sci.*— 1989.— 44, N 11.— P. 2493—2500.
28. Dowling N. I., Hynes I. B., Brown D. M. Kinetics of the reaction between hydrogen and sulfur under high—temperature Claus furnace conditions // *Ind. Eng. Chem. Res.*— 1990.— 29, N 12.— P. 2327—2332.
29. Frenklach M., Lee J. H., White J. N. et al. Oxidation of hydrogen sulfide // *Combust. Flame.*— 1981.— 41.— P. 1—16.
30. Falconer W. E., Van Tiggelen A. A kinetic study of hydrocarbon—oxygen nitrogen flame systems and molecular weights of chain carriers // 9th Symp. (Int.) on Combust.— 1963.— P. 689—702.
31. Теснер П. А., Немировский М. С., Мотыль Д. Н. Кинетика реакции Клауса при 800—1200 °С // *Кинетика и катализ.*— 1989.— 30, вып. 5.— С. 1015—1019.
32. Henkel M. J., Hummel H., Spaulding W. P. Theory of propagation of flames. Pt 3: Numerical integrations // 3th Symp. (Int.) on Combust.— 1949.— P. 135—140.
33. Koshi M., Ando H., Oya M. et al. Shock-tube study of decomposition of nitric oxide at high temperatures // 15th Symp. (Int.) on Combust.— 1975.— P. 809—822.
34. Lyon R. K., Benn D. Kinetics of the NO—NH<sub>3</sub>—O<sub>2</sub> reaction // 17th Symp. (Int.) on Combust.— 1978.— P. 601—610.
35. Okazaki Tatsua et al. Kinetic study of the oxidation of nitric oxide with ozone in the pressure range of 1 to 23 mPa by the flow method // *Bull. Facult. Eng. Univ. Tokushima.*— 1989.— 26.— P. 15—25.
36. Michel K. W., Wagner H. Gg. The pyrolysis and oxidation of hydrazine behind shock waves // 10th Symp. (Int.) on Combust.— 1965.— P. 353—364.
37. Soloukhin R. I. High temperature oxidation of ammonia, carbon monoxide and methane by nitrous oxide in shock waves // 13th Symp. (Int.) on Combust.— 1971.— P. 121—128.
38. Генич А. П., Левин В. А., Осинкин С. Ф. Окисление аммиака в воздухе за прямым скачком уплотнения // *Горение и взрыв.*— М.: Наука, 1972.— С. 662—667.
39. Межеричкий С. М., Гурович Б. М., Камиллов Р. Р. К вопросу образования окиси азота при сжигании сероводородсодержащего газа // *Проблемы теплоэнергетики: Материалы 8 Всесоюз. симп. по горению и взрыву.*— Черногловка, 1986.—
40. Gray P., Lee J. C., Leach H. A. et al. The propagation and stability of the decomposition flame of hydrazine // 6th Symp. (Int.) on Combust.— 1956.— P. 255—263.
41. Gray P., Lee J. C. Explosive decomposition and combustion of hydrazine // 5th Symp. (Int.) on Combust.— 1955.— P. 692—700.
42. Eberstein I. J., Glassman I. Gas-phase decomposition of hydrazine and its methyl derivatives // 10th Symp. (Int.) on Combust.— 1965.— P. 365—374.
43. Wedlich R. C., Davis D. D. Non-isothermal kinetics of hydrazine decomposition // *Thermochim. Acta.*— 1990.— 171.— P. 1—13.
44. Szwarc M. The dissociation energy of the N—N bond in hydrazine // *Proc. Roy. Soc.*— 1949.— A198.— P. 267—284.
45. Sawyer R. F., Glassman I. Gas-phase reactions of hydrazine with nitrogen dioxide, nitric oxide and oxygen // 11th Symp. (Int.) on Combust.— 1966.— P. 861—869.
46. Болотов В. И., Макаров Л. М. Определения макрокинетических констант термического распада закиси азота по критическим параметрам поджигания // *ФГВ.*— 1991.— 27, № 6.— С. 81—86.

47. Soloukhin R. I. High temperature oxidation of hydrogen by nitrous oxide in shock waves // 14th Symp. (Int.) on Combust.—1973.— P. 77—82.
48. Laffitte P., Hajal I., Combourieu J. The decomposition flame of hydrogen azide // 10th Symp. (Int.) on Combust.—1965.— P. 79—85.
49. Арутюнов В. С., Веденев В. И., Ушаков В. А. и др. Кинетика восстановления диоксида серы водородом в области 1000—1200 К // Кинетика и катализ.—1990.— 31, вып. 1.— С. 13—18.
50. Chan L. K., Sarofim A. F., Beer J. M. Kinetics of the NO—carbon reaction at fluidized bed combustor conditions // Combust. Flame.—1983.— 52.— P. 37—46.
51. Lebel J., Ouellet C. On the gas-phase oxidation of carbon suboxide and monoxide // 13th Symp. (Int.) on Combust.—1971.— P. 301—308.
52. Sebolev G. K. High-temperature oxidation and burning of carbon monoxide // 7th Symp. (Int.) on Combust.—1959.— P. 386—391.
53. Chung S. H., Williams F. A. Asymptotic structure and extinction of CO—H<sub>2</sub> diffusion flames with reduced kinetic mechanisms // Combust. Flame.—1990.— 82.— P. 389—410.
54. Kozlov G. I. On high-temperature oxidation of methane // 7th Symp. (Int.) on Combust.—1959.— P. 142—149.
55. Yetter R. A., Dryer F. L., Rabitz H. Complications of one-step kinetics for moist CO oxidation // 21th Symp. (Int.) on Combust.—1986.— P. 749—760.
56. Lyon R. K., Hardy J. E., Von Holt W. Oxidation kinetics of wet CO in trace concentrations // Combust. Flame.—1985.— 61.— P. 79—86.
57. Лавров П. В., Карбивничий-Кузнецов В. Б. // Изв. Наук. Узб. ССР.—1968.— 25.— С. 9. Цит. по [55].
58. Dryer F. L., Glassman I. High-temperature oxidation of CO and CH<sub>4</sub> // 14th Symp. (Int.) on Combust.—1973.— P. 987—1003.
59. Chang W. D., Senkan S. M. A computational study of the inhibition of humid CO oxidation by HCl and Cl<sub>2</sub> during the induction period // Combust. Sci. Technol.—1985.— 43.— P. 49—66.
60. Bauer S. H., Jeffers P., Lifshitz A. et al. Reaction between CO and SO<sub>2</sub> at elevated temperatures: a shock-tube investigation // 13th Symp. (Int.) on Combust.—1971.— P. 417—425.
61. Hottel H. C., Williams G. C., Nerheim N. M. et al. Kinetic studies in stirred reactors: combustion of carbon monoxide and propane // 10th Symp. (Int.) on Combust.—1965.— P. 111—121.
62. Дроздов М. С., Гордон Е. Б., Москвин Ю. Л. и др. Самовоспламенение смесей сероуглерода с кислородом на нижнем пределе // Кинетика химических реакций: Материалы 6 Всесоюз. симп. по горению и взрыву.—Черноголовка.—1980.— С. 78—80.
63. Glick H. S. Shock-tube study of reaction kinetics of aliphatic hydrocarbons // 7th Symp. (Int.) on Combust.—1959.— P. 98—107.
64. Combourieu J., Moreau R. A study of ClO<sub>2</sub>—CH<sub>4</sub>, ClO<sub>2</sub>—O<sub>2</sub>—CH<sub>4</sub>, ClO<sub>2</sub>—N<sub>2</sub> (or Ar) CH<sub>4</sub> flames at low pressures // 12th Symp. (Int.) on Combust.—1969.— P. 1015—1023.
65. Spangenberg H.-J., Borger I., Drost H. et al. Measured and calculated distributions of chemical species during the pyrolysis of methane in plasma jets and behind reflected shock waves // Z. Phys. Chem. Leipzig.—1986.— 267, N 6.
66. Enkolopyan N. S. Kinetics and mechanism of methane oxidation // 7th Symp. (Int.) on Combust.—1959.— P. 157—164.
67. Glass G. P., Kistiakowsky G. B., Michael J. V. et al. The oxidation reactions of acetylene and methane // 10th Symp. (Int.) on Combust.—1965.— P. 513—522.
68. Yanpee M., Grard F. The kinetics of the slow combustion of methane at high temperatures // 5th Symp. (Int.) on Combust.—1955.— P. 484—490.
69. Mobsby J. A., Fussey D. E. A three-environment mixing model for turbulent flame studies // 17th Symp. (Int.) on Combust.—1978.— P. 411—419.
70. Lifshitz A., Barzilai-Gilboa S. The effect of NO<sub>2</sub>-group on the ignition delay times of straight and cyclic hydrocarbons // 20th Symp. (Int.) on Combust.—1984.— P. 631—638.
71. Fenimore C. P. Destruction of methane in water gas by reaction of CH<sub>3</sub> with OH radicals // 12th Symp. (Int.) on Combust.—1969.— P. 463—468.
72. Борисов А. А., Заманский В. М., Лисянский В. В. и др. Кинетика выделения энергии при высокотемпературном воспламенении смесей углеводородов с воздухом и кислородом // Хим. физика.—1988.— 7, № 5.— С. 665—673.
73. Paczko G., Lefdal P. M., Peters N. Reduced reaction schemes for methane, methanol and propane flames // 21th Symp. (Int.) on Combust.—1986.— P. 739—748.
74. Peters N., Kee R. J. The computation of stretched laminar methane—air diffusion flames using a reduced four-step mechanism // Combust. Flame.—1987.— 68.— P. 17.
75. Tsuboi T., Wagner H. G. Homogeneous thermal oxidation of methane in reflected shock waves // 15th Symp. (Int.) on Combust.—1974.— P. 883—890.
76. Eubank C. S., Rabinowitz M. J., Cardiner W. C. Jr. et al. R. E. Shock-initiated ignition of natural gas—air mixtures. // 18th Symp. (Int.) on Combust.—1981.— P. 1767—1774.
77. Williams G. C., Hottel H. C., Morgan A. C. The combustion of methane in a jet-mixed reactor // 12th Symp. (Int.) on Combust.—1969.— P. 913—925.

78. Narasimhan K. S., Foster P. J. The rate of growth of soot in turbulent flow with combustion products and methane // 10th Symp. (Int.) on Combust.—1965.— P. 253—257.
79. Bradley D., Hundy G. F. Burning velocities of methane — air mixtures using hot-wire anemometers in closed-vessel explosions // 13th Symp. (Int.) on Combust.—1971.— P. 575—583.
80. Van Tiggelen, Cow. Oxidations et combustions.—1968.— 1, chap. 6.— Paris. Цит. по: De Soete G. G. // 13th Symp. (Int.) on Combust.—1971.— P. 735—743.
81. Coffee T. P. On simplified reaction mechanisms by oxidation of hydrocarbon fuels in flames by Westbrook and Dryer // Combust. Sci. Technol.—1985.— 43.— P. 333—339.
82. Aronowitz D., Santoro R. J., Dryer F. L. et al. Kinetics of the oxidation of methanol: experimental results of semi-global modeling and mechanistic concepts // 17th Symp. (Int.) on Combust.—1978.— P. 633—644.
83. Bowman C. T. A shock-tube investigation of the high-temperature oxidation of methanol // Combust. Flame.—1975.— 25.— P. 343—354.
84. Tsuboi T., Hashimoto K. Shock-tube study of homogeneous thermal oxidation of methanol // Ibid.—1981.— 42.— P. 61—76.
85. Борисов А. А., Заманский В. М., Лисянский В. В. и др. Высокотемпературное окисление метанола // Хим. физика.—1989.— 8, № 8.— С. 1102—1109.
86. Steacie E. W. R., Shaw G. T. The homogeneous unimolecular decomposition of gaseous methyl nitrite // Proc. Roy. Soc.—1934.— A146.— P. 388.
87. Adams G. K. Flame propagation in methyl and ethyl nitrate vapors // 5th Symp. (Int.) on Combust.—1955.— P. 656—664.
88. Fifer R. A. High-temperature pyrolysis of methyl (and ethyl) nitrate // 17th Symp. (Int.) on Combust.—1978.— P. 587—599.
89. Sheer M. D. Kinetics of the gas-phase oxidation of formaldehyde // 5th Symp. (Int.) on Combust.—1955.— P. 435—446.
90. Singh T., Sawyer R. F. CO reactions in the afterflame region of ethylene/oxygen and ethane/oxygen flames // 13th Symp. (Int.) on Combust.—1971.— P. 403—416.
91. Борисов А. А., Заманский В. М., Лисянский В. В. и др. Задержки самовоспламенения смесей углеводородов C2—C4 с кислородом // Кинетика химических реакций: Материалы 9 Всесоюз. симп. по горению и взрыву.—Черноголовка, 1989.— С. 25—28.
92. Bauer S. H. Transient species generated during the pyrolysis of hydrocarbons // 11th Symp. (Int.) on Combust.—1967.— P. 105—115.
93. Baker J. A., Skinner G. B. Shock-tube studies on the ignition of ethylene — oxygen — argon mixtures // Combust. Flame.—1972.— 19.— P. 347—350.
94. Hidaka Y., Kataoka T., Suga M. // Bull. Chem. Soc. Jap.—1974.— 47.— P. 2166.
95. Huang W. M., Vosen S. R., Greif R. Heat transfer during laminar flame quenching: effect of fuels // 21th Symp. (Int.) on Combust.—1986.— P. 1853—1860.
96. Frenklach M., Taki S., Durgaprasad M. B. et al. Soot formation in shock-tube pyrolysis of acetylene, allene and 1,3-butadiene // Combust. Flame.—1983.— 54.— P. 81—101.
97. Kistiakowsky G. B., Richards L. W. Emission of vacuum ultraviolet radiation from the acetylene — oxygen and the methane — oxygen reactions in shock waves // J. Chem. Phys.—1962.— 36.— P. 1707—1714.
98. Hicks J. A. The low-pressure decomposition flame of ethyl nitrate // 8th Symp. (Int.) on Combust.—1962.— P. 487—496.
99. Mueller K. H., Walters W. D. // J. Am. Chem. Soc.—1951.— 73.— P. 1458. Цит. по: Griffiths J. F., Perche A. // 18th Symp. (Int.) Combust.—1981.— P. 893.
100. Cambel A. B., Jennings B. H. Gas dynamics.—1958.— P. 340. Цит. по: Choudhury P. R., Cambel A. B. // 8th Symp. (Int.) Combust.—1960.— P. 963—969.
101. Карнаухова Л. И., Волгина И. Б., Степухович А. Д. Влияние оксида этилена и водорода на пиролиз пропана // Нефтехимия.—1987.— 27, № 2.— С. 210—214.
102. Jones W. P., Priddin C. H. Predictions of the flow field and local gas composition in gas turbine combustors // 17th Symp. (Int.) on Combust.—1978.— P. 399—409.
103. Kennel C., Gottgens J., Peters N. The basic structure of lean propane flames // 23th Symp. (Int.) on Combust.—1990.— P. 479—485.
104. Burcat A., Lifshitz A., Scheller K. et al. Shock-tube investigation of ignition in propane — oxygen — argon mixtures // 13th Symp. (Int.) on Combust.—1971.— P. 745—755.
105. Gerstein M. Combustion and propulsion, 3d AGARD Coll.— N. Y.: Pergamon Press.—1958.— P. 307. Цит. по: Choudhury P. R., Cambel A. B. // 8th Symp. (Int.) Combust.—1960.— P. 963—969.
106. Chang C. J., Thompson A. L., Winship R. D. Ignition delay of propane in air between 725—880 °C under isothermal conditions // 7th Symp. (Int.) on Combust.—1959.— P. 431—435.
107. Schefer R. W., Sawyer R. F. Lean premixed recirculating flow combustion for control of oxides of nitrogen // 16th Symp. (Int.) on Combust.—1976.— P. 119—134.
108. Розловский А. И. Кинетика хлорирования хлорпропана // Кинетика и катализ.—1988.— 29, № 2.— С. 469—471.
109. Ashmead B. V., Thomas J. H. Gas-phase reaction between NO<sub>2</sub> and acetylenes // 14th Symp. (Int.) on Combust.—1973.— P. 493—500.



110. Elbe G., White G. Branched-chain mechanisms of bis-difluoro-aminoalkane explosions // 13th Symp. (Int.) on Combust.— 1970.— P. 693—704.
111. Ferrer M., David R., Villermaux J. Homogeneous oxidation of *n*-butane in a self-stirred reactor // Oxid. Commun.— 1983.— 4, N 1—4.— P. 353—368.
112. Александров Ю. А., Барышников Ю. Ю., Захаров И. А. и др. Газофазное автоокисление тетраметилолова в стационарном режиме // Кинетика и катализ.— 1990.— 31, вып. 3.— С. 727.
113. Борисов А. А., Заманский В. М., Лисянский В. В. и др. Самовоспламенение фурана и сивльвана в смесях с кислородом // Проблемы горения и взрыва: Материалы 9 Всесоюз. симп. по горению и взрыву.— Черноголовка, 1988.— С. 82—84.
114. Szivoczka L., Woog J. Pyrolysis of pentanes in the absence and the presence of CCl<sub>4</sub>. 1. Overall kinetics // Acta Chim. Hung.— 1987.— 124, N 4.— P. 637—647.
115. Левич С. С., Абаджев С. С., Шевчук В. В. // Кинетика и катализ.— 1973.— 13.— С. 431. Цит. по [114].
116. Singh H. J., Kern R. D. Pyrolysis of benzene behind reflected shock waves // Combust. Flame.— 1983.— 54.— P. 49—59.
117. Muller U. C., Peters N., Linan A. Global kinetics for *n*-heptane ignition at high pressures // Prepared for presentation at the 24th Symp. (Int.) on Combust, 1992.
118. Greenberg J. B., Tambour Y. Far-field coalescence effects in polydisperse spray jet diffusion flames // 21th Symp. (Int.) on Combust.— 1986.— P. 655—663.
119. Лисочкин Я. А., Позняк В. И., Рыкунов В. А. Ингибирование щелочными металлами газофазного окисления и горения углеводородов // Горение газов и натуральных топлив: Материалы 6 Всесоюз. симп. по горению и взрыву.— Черноголовка, 1980.— С. 79—82.
120. Arbib H. A., Goldman Y., Greenberg J. B. et al. A numerical model of high intensity confined hydrocarbon combustion // Combust. Flame.— 1980.— 38.— P. 259—270.
121. Schefer R. W., Sawyer R. F. Pollutant formation in fuel lean recirculating flows // NASA CR — 2785, Dec.— 1976.
122. Fenimore C. P., Jones G. W. Consumptions of oxygen molecules in hydrocarbon flames chiefly by reaction with hydrogen atoms // J. Phys. Chem.— 1959.— 63.— P. 1834—1838.
123. Presser C., Goldman Y., Greenberg J. B. et al. Control of flame configuration and combustion performance in industrial furnaces // 18th Symp. (Int.) on Combust.— 1981.— P. 1939—1948.
124. Wang T. S., Farmer R. C., Edelman R. B. Turbulent combustion kinetics for complex hydrocarbon fuels // AIAA-88-0733.— 1988.— P. 1—7.

г. Новосибирск

Поступила в редакцию 14/XII 1992

УДК 532.59

А. А. Борисов, О. В. Шарыпов

### САМОПОДДЕРЖИВАЮЩИЕСЯ УЕДИНЕННЫЕ ВОЛНЫ В НЕРАВНОВЕСНЫХ СРЕДАХ

Работа посвящена созданию оригинальной модели распространения волн слабой, но конечной амплитуды, инициирующих неравновесный экзотермический процесс, связанный с химической реакцией или релаксацией в среде. Среда может быть однофазной (газовой) или двухфазной (жидкость с пузырьками). Построена нелинейная дифференциальная модель, описывающая кинетико-волновое взаимодействие и эволюцию волн. Линейные дисперсионные и диссипативные свойства данных систем исследованы как аналитически, так и численно. Особое внимание уделено объяснению физического механизма режима формирования уединенной самоподдерживающейся волны, которую в терминологии синергетики можно было бы назвать диссипативной структурой.

Большое количество трудов, начиная с классических [1], посвящено проблеме описания кинетико-волнового взаимодействия в неравновесных системах с химической реакцией или релаксацией. Явление усиления акустических возмущений в средах с пространственно однородно распределенной реакцией или релаксацией впервые аналитически смоделировано в [2, 3]. В [4] получено точное эволюционное уравнение для слабонелинейных волн в неравновесных реагирующих средах, причем численно проинтегрирован высокочастотный предел полученного уравнения.

© А. А. Борисов, О. В. Шарыпов, 1993.