

УДК 536.46:546.11

КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ПЛАМЕНИ $H_2/O_2/N_2$ ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ

© 2009 г. О. П. Коробейничев, А. Г. Шмаков, И. В. Рыбцкая, Т. А. Большова,
А. А. Чернов, Д. А. Князьков, А. А. Коннов

E-mail: korobein@kinetics.nsc.ru

Поступила в редакцию 26.03.2008 г.

Кинетика и механизм химических реакций в пламени $H_2/O_2/N_2$ изучены экспериментально и путем моделирования структуры ламинарных предварительно перемешанных плоских атмосферных пламен $H_2/O_2/N_2$ с различным соотношением компонентов в исходной смеси. Профили концентрации стабильных соединений (H_2 , O_2 , H_2O), а также атомов H и радикалов OH^{\bullet} измерены в пламенах методом зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии с мягкой ионизацией электронным ударом. Сопоставление полученных экспериментальных данных с результатами моделирования по трем известным кинетическим механизмам показало их хорошее согласие, а также подтвердило возможность использования этих механизмов для описания структуры пламени в водородно-кислородных смесях при атмосферном давлении.

Механизм и химия горения, зажигания, воспламенения смесей водорода с кислородом на протяжении многих лет служили и до сих пор служат предметом детальных исследований. Одна из причин состоит в том, что горение и воспламенение водородно-кислородных смесей являются яркими примерами, в которых реализуется механизм разветвленных цепных реакций, открытых Н.Н. Семеновым и подробно исследованных его школой [1–6]. В настоящее время разработано много модификаций кинетического механизма реакций воспламенения и горения водорода [1–16], в которых исчерпывающе доказан цепной механизм реакций. Однако в недавно опубликованной работе [17] отрицается разветвленно-цепной характер воспламенения и горения водорода в области давлений, близких к атмосферному. Известно, что прогресс в развитии представлений о механизме химических реакций в пламенах основан на сопоставлении экспериментальных данных (по скорости распространения, задержке воспламенения, структуре пламени и др.), полученных в максимально широком диапазоне условий (давление, температура, исходный состав горючей смеси), с результатами численных расчетов, базирующихся на тестируемом механизме.

Определяющую роль в механизмах разветвленных цепных процессов играют реакции с активными центрами – атомами и радикалами. Поэтому наиболее важной, но и наиболее трудной задачей является измерение их концентрации и регистрация профилей их концентрации в пламени. Одним из наиболее эффективных методов для этого является зондовая молекулярно-пучковая масс-спектрометрия с мягкой ионизацией элек-

тронным ударом. Г. Эльтентон [14], а затем С. Фонер и Р. Хадсон [15] были пионерами применения этого метода для детектирования атомов и радикалов в разреженных пламенах. Зондовая молекулярно-пучковая масс-спектрометрия (ЗМПМС) как наиболее универсальный метод с точки зрения возможности одновременного измерения концентраций всех соединений в пламени, включая атомы и свободные радикалы, широко используется для изучения структуры пламен, в том числе и водородно-кислородных смесей. Большинство работ по изучению структуры этих пламен относится к области субатмосферных давлений [16, 18–20], что связано с трудностями применения метода ЗМПМС при $p = 1$ атм. Тем не менее, нужно отметить, что в литературе известны несколько работ по исследованию структуры водородно-кислородных пламен при атмосферном и повышенном давлении [21–23]. В этих работах были получены профили концентраций только стабильных соединений в пламенах богатого [21–22] и стехиометрического [23] составов. Для детальной и глубокой проверки кинетического механизма химических реакций при горении водорода при давлении 1 атм необходимы данные о распределении концентраций таких активных соединений, как H и OH^{\bullet} в этих пламенах. Целью данной работы является разработка и апробация метода зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии с мягкой ионизацией электронным ударом для изучения структуры пламени (в первую очередь концентраций активных частиц – H и OH^{\bullet} – и их профилей) при атмосферном давлении, а также его применение для изучения структуры “атмосферного” пламени $H_2/O_2/N_2$ различного стехио-

метрического состава. Сопоставление результатов эксперимента и моделирования с использованием известных в литературе механизмов позволило бы также проверить справедливость этих механизмов.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Чтобы проводить исследования в условиях, близких к адиабатическим условиям свободного распространения пламени, использовали метод баланса потока тепла (БПТ) в горелку [24, 25]. Горелка представляла собой трубку высотой 35 см, на которой установлен медный диск диаметром 24 мм и толщиной 3 мм с отверстиями диаметром 0.5 мм, равномерно расположенными на расстоянии 0.7 мм друг от друга. Нагрев медного диска и горючей смеси проводили по внешнему диаметру горелки с помощью циркулирующей воды и термостатов. Температуру краев диска поддерживали 60°C, а температуру горючей смеси (водород, кислород и азот) – 35°C. Скорости потоков исходных горючих смесей для пламен с $\phi = 1.1$ и 2.0 ($\phi = [H_2]/[H_2]_{\text{стехиом}}$) установлены на 1–4 см/с меньше скорости их распространения, определенной методом НТП с помощью данной горелки. Пламя с $\phi = 0.47$ имеет ячеистую структуру. Для того чтобы этого избежать, его структуру определяли при скорости потока на 40% меньше скорости свободного распространения пламени. Состав и расход горючих смесей устанавливали с помощью регуляторов массового расхода газов фирмы “MKS Instruments Inc”. Чистота газов (H_2 , O_2 , N_2) составляла 99.95%.

Для измерения радиального температурного распределения на поверхности горелки в ее отверстия были впаяны медно-константановые термопары на расстояниях 0, 2.4, 4.5, 7.0, 10.0 и 12.0 мм от оси горелки. Для стабилизации пламени в условиях, близких к адиабатическим, и измерения скорости его распространения был использован метод БПТ [24, 25]. В этом методе скорость потока газа через горелку выбирается такой, при которой потери тепла в горелке компенсируются контролируемым подогревом смеси и баланс теплотерь, определяемый с помощью вмонтированных в поверхность горелки микротермопар, близок к нулю.

При исследовании структуры пламени для его стабилизации скорость потока смеси была несколько ниже скорости его свободного распространения. Так, для калибровочного пламени скорость потока составляла 42.5 см/с при скорости свободного распространения 47 см/с. В таблице приведены начальные условия, состав и рассчитанная с помощью программ [26–28] и с использованием механизма [8] скорость распространения исследованных пламен.

Условия эксперимента

Условия эксперимента	Богатое пламя	Калибровочное пламя	Бедное пламя
$\phi = [H_2]/[H_2]_{\text{стехиом}}$	2	1.1	0.47
$D = [O_2]/([O_2] + [N_2])$	0.077	0.090	0.209
$[H_2]$, мол. доля	0.2355	0.1653	0.1642
$[O_2]$, мол. доля	0.0589	0.0751	0.1747
$[N_2]$, мол. доля	0.7056	0.7596	0.6611
Скорость газа на поверхности горелки в эксперименте, см/с	40.70	42.50	34.24
Измеренная скорость свободного распространения пламени, см/с	41.1	47.0	55.0
Скорость свободного распространения пламени, рассчитанная с использованием механизма [8], см/с	39.6	38.3	36.2

Температурный профиль в пламени измеряли с помощью (Pt/Pt + 10%Rh)-термопары диаметром 0.02 мм, покрытой SiO_2 . Спай термопары располагали на расстоянии 0.2 мм от кончика зонда для учета возмущений, вносимых зондом. Полученный температурный профиль использовали для моделирования с помощью программ [26–28].

Известно, что пробоотборник вносит возмущение в структуру пламени, которое складывается из теплового и газодинамического воздействия. Тепловое возмущение заключается в том, что пробоотборник охлаждает пламя. Для учета этого при расчете профилей концентрации соединений в пламени по программам [26–28] использовали профили температуры, измеренные с помощью тонкой термопары (диаметром ~ 0.04 мм), расположенной на фиксированном расстоянии (в данном случае 0.2 мм) от отверстия пробоотборника. Учет газодинамического возмущения пламени зондом осуществляли путем “сдвига” вверх по потоку измеренных профилей концентрации относительно измеренного профиля температуры и рассчитанных профилей концентраций веществ на величину ΔZ , оцененную по полуэмпи-

рической формуле [29]: $\Delta Z = 0.37d \sqrt{\frac{Q}{Sv}}$, где d – диаметр отверстия зонда, Q – расход газа через отверстие зонда, S – площадь отверстия зонда, v – скорость набегающего потока газа. Максимальная величина “сдвига” соответствует положению зонда на максимально близком расстоянии от поверхности горелки и составляет 0.3 мм.

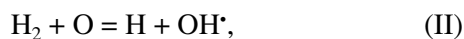
Для измерения профилей концентраций веществ использовали молекулярно-пучковую систему отбора пробы и квадрупольный масс-спектрометр МС7302, оснащенный модернизированным

ным ионным источником с мягкой ионизацией [30]. Отбор пробы проводили на различных расстояниях от поверхности горелки с помощью кварцевого зонда (диаметр отверстия 0.08 мм и угол раствора 40°. Для расчета концентрационных профилей использовали калибровочные коэффициенты веществ, которые для стабильных компонентов пламени (O₂, H₂O) получали прямой калибровкой. Для этого проводили измерение интенсивности соответствующих основных пиков масс 32 и 18 для воздуха с парами воды, нагретыми до 200°C. Аргон, имеющийся в составе воздуха, являлся реперным пиком. Калибровочный коэффициент (k_i) относительно калибровочного коэффициента аргона вычисляли по формуле

$$k_i = C_i I_{40} / C_{Ar} I_i, \quad (1)$$

где I_i , I_{40} – интенсивности материнского пика соединения i и аргона соответственно, C_i , C_{Ar} – мольная доля калибруемого соединения и аргона соответственно.

Концентрации атомов и радикалов в пламени измеряли при энергии ионизации электронов 16.2 эВ. Для определения концентраций H, O и OH* в пламени по интенсивностям пиков соответствующих масс был применен хорошо известный в литературе [31] и уже применявшийся нами для субатмосферных водородо-кислородных пламен [32] метод, основанный на том факте, что в водородных пламенах в зоне продуктов горения имеет место детальное равновесие по трем “быстрым” реакциям:



с соответствующими константами равновесия K_1 , K_2 и K_3 [33]:

$$K_1 = 0.113T^{0.0839}e^{7680/T}, \quad (2)$$

$$K_2 = 1.8T^{0.027}e^{-917/T}, \quad (3)$$

$$K_3 = 302T^{-0.374}e^{-8620/T}. \quad (4)$$

Выражения для концентраций H, O и OH* в этом приближении имеют вид:

$$[OH^*] = \sqrt{K_2 K_3 [O_2][H_2]}, \quad (5)$$

$$[O] = \frac{K_1 K_3 [H_2][O_2]}{[H_2O]}, \quad (6)$$

$$[H] = \frac{K_1 [H_2]}{[H_2O]} \sqrt{K_2 K_3 [O_2][H_2]}. \quad (7)$$

Для определения концентраций радикалов и нахождения из них калибровочных коэффициентов для радикалов H, O, OH* были экспериментально измерены концентрации H₂, O₂ и H₂O на

нескольких расстояниях от поверхности горелки, а также температура.

Концентрацию H₂ в зоне конечных продуктов сгорания определяли хроматографическим методом. В этой зоне концентрация водорода практически не меняется. Диаметр отверстия микрозонда составлял 0.08 мм, общий диаметр микрозонда у отверстия 0.12 мм, угол при вершине 20°. Пробу газа из пламени отбирали в предварительно откачанный стеклянный сосуд до установления в нем давления 301 Торр, а затем пробу разбавляли азотом до давления 756 Торр. В процессе отбора пробы пары воды вымораживали с помощью ловушки, охлаждаемой жидким азотом и расположенной между микрозондом и стеклянным сосудом.

Используя формулы (5)–(7) и значения концентраций стабильных веществ и констант равновесия, были вычислены концентрации H, O и OH* для пламени с $\phi = 1.1$, $D = 0.09$ ($D = [O_2]/([O_2] + [N_2])$) в зоне конечных продуктов сгорания. На основе этих данных были определены калибровочные коэффициенты для H и OH*. Калибровочный коэффициент для атомарного кислорода измерить с достаточной точностью не удалось из-за его низкой концентрации в зоне конечных продуктов сгорания. Оценки показывают, что относительная точность определения концентраций, полученных в данной работе из измеренных интенсивностей пиков масс атомов и радикалов, меняется по зоне горения и находится в пределах от 40 до 60%.

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Моделирование скорости распространения пламени выполняли с помощью программных пакетов PREMIX и CHEMKIN-II [26–28], которые позволяют описывать многокомпонентные ламинарные пламена с учетом их термодинамики, кинетики, транспортных свойств, а также детального химического механизма реакций.

В расчетах использовали три механизма реакций [7, 8, 34], учитывали мультикомпонентную диффузию и термодиффузию соединений в пламени, параметры GRAD = 0.02 и CURV = 0.5.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1–3 представлены профили концентраций стабильных соединений (H₂O, H₂, O₂), а также H и OH*, измеренные в пламени с $\phi = 1.1$, 0.47 и 2.0 соответственно. На этих же рисунках представлены результаты численного моделирования структуры пламени с использованием трех различных механизмов окисления водорода [7, 8, 34]. Сравнение приведенных профилей концентраций стабильных соединений показывает, что результаты расчета по всем трем механизмам находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Небольшие расхождения экспериментально из-

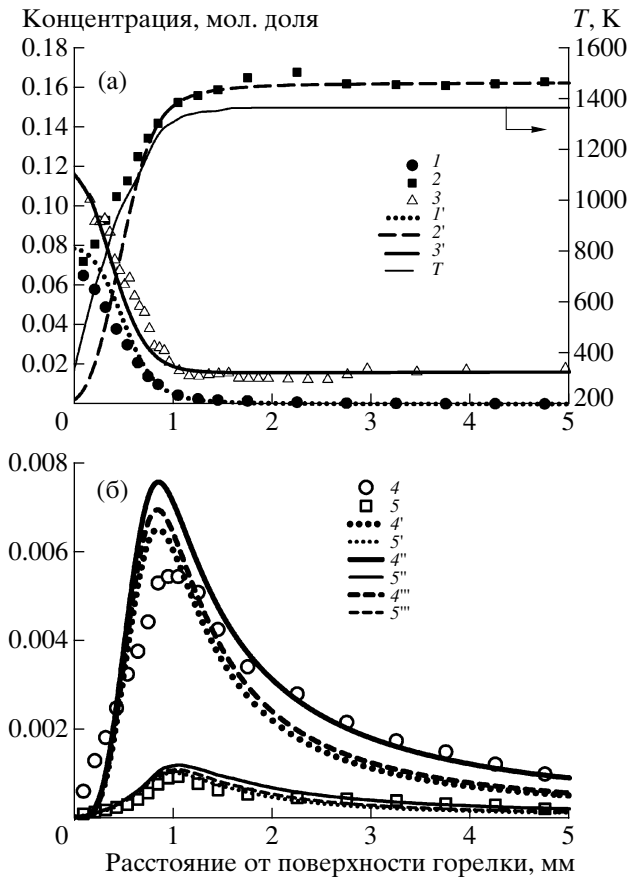


Рис. 1. Профили температуры и концентраций стабильных соединений O_2 (1, 1'), H_2O (2, 2') и H_2 (3, 3') (а), атомов Н (4, 4', 4'', 4''') и радикалов OH^* (5, 5', 5'', 5''') (б) в пламени $H_2/O_2/N_2$ с $\phi = 1.1$, $D = 0.09$. Символы – эксперимент, линии – результаты численного моделирования: 4', 5' – расчет по механизму [8], 4'', 5'' – по механизму [34]; 4''', 5''' – по механизму [7].

меренных профилей концентрации H_2O вблизи поверхности горелки с данными моделирования связаны с тем, что калибровочный коэффициент для H_2O меняется в зависимости от температуры пламени, что связано с образованием кластеров H_2O в молекулярном пучке при зондовом отборе пробы из низкотемпературной зоны пламени. Таким образом, в эксперименте завышенная концентрация H_2O вблизи поверхности горелки связана с экспериментальными ошибками.

Сопоставление профилей концентрации OH^* , измеренных в пламени с $\phi = 0.47$, 1.1, и данных численного моделирования (рис. 1б и рис. 2) показало их удовлетворительное согласие. Необходимо отметить, что по результатам измерений положение максимума концентрации OH^* сдвинуто на ~ 0.10 – 0.13 мм относительно данных расчета в направлении зоны конечных продуктов сгорания. Измеренная максимальная концентрация OH^* в пламени с $\phi = 0.47$ и 1.1 составляет 2.0×10^{-3} и $9.1 \times$

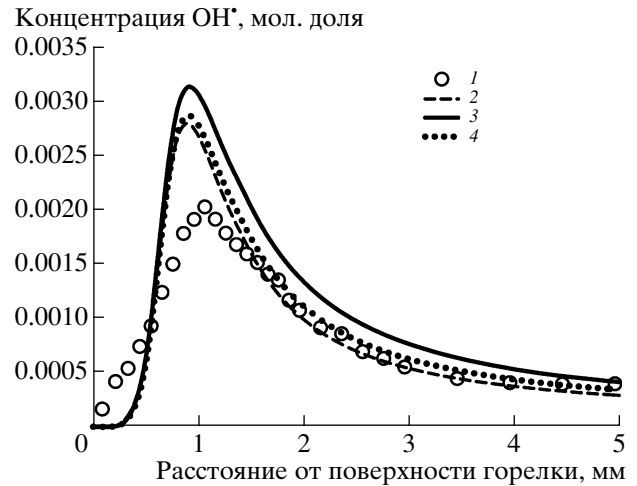


Рис. 2. Профили концентраций радикалов OH^* в пламени $H_2/O_2/N_2$ с $\phi = 0.47$, $D = 0.209$: 1 – эксперимент; 2, 3, 4 – результаты численного моделирования по механизмам [7], [34] и [8] соответственно.

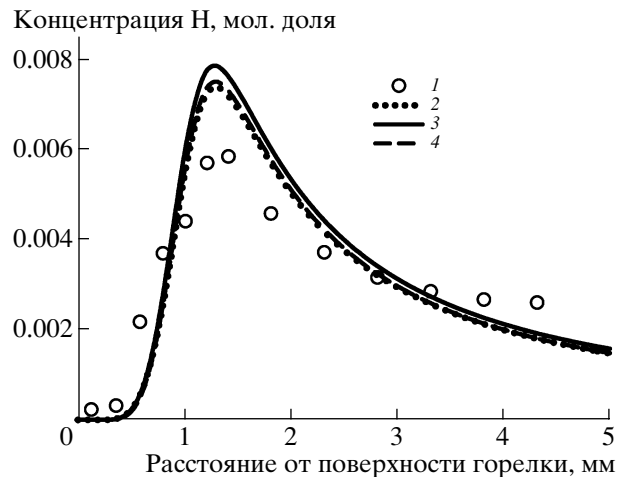


Рис. 3. Профили концентраций атомов Н в пламени $H_2/O_2/N_2$ с $\phi = 2.0$, $D = 0.077$: 1 – эксперимент; 2, 3, 4 – результаты численного моделирования по механизмам [7], [34] и [8] соответственно.

$\times 10^{-4}$ мол. доля соответственно, что меньше величин, полученных в расчетах на 20–30%.

Профили концентрации Н, измеренные в пламени с $\phi = 1.1$ и 2.0 (рис. 1б и рис. 3), также удовлетворительно согласуются с результатами расчетов. Как и для профилей концентрации OH^* , наблюдается небольшой сдвиг (0.10–0.13 мм) максимума измеренной концентрации Н относительно рассчитанной. Такой сдвиг обусловлен ошибками при учете возмущений пламени пробоотборником. Максимальная экспериментально полученная концентрация Н в пламени с $\phi = 1.1$ и 2.0 составляет 5.4×10^{-3} и 5.9×10^{-3} мол. доля соответственно, что на 16–30% меньше величин, полученных в расчетах. Равновесные концентрации Н, рассчитанные при температу-

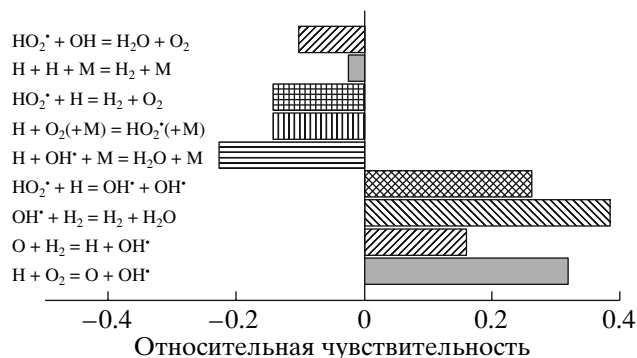


Рис. 4. Относительная чувствительность скорости распространения пламени $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ с $\phi = 1.1$, $D = 0.09$ к константам скорости наиболее важных реакций.

рах 1250 и 1160 К, соответствующих температурам максимума концентрации Н для каждого пламени, составляют 6.14×10^{-8} и 3.2×10^{-8} мол. доля соответственно.

Таким образом, экспериментально полученные результаты находятся в удовлетворительном соответствии с результатами расчетов (в пределах ошибки эксперимента). Измеренные в работе высокие сверхравновесные концентрации промежуточных частиц непосредственно указывают на разветвленно-цепной характер реакций в атмосферном пламени водорода и являются подтверждением корректности использованных кинетических механизмов, а также разработанных методов измерения концентраций активных частиц в пламени. Анализ чувствительности рассчитанной величины скорости свободного распространения атмосферного пламени $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ (состава $\phi = 1.1$, $D = 0.09$, структура которого была исследована в эксперименте (рис. 1) к константам скорости стадий, входящих в рассматриваемые механизмы, показал, что наиболее важными реакциями рекомбинации являются реакции $\text{HO}_2^\bullet + \text{OH}^\bullet = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$, $\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$, $\text{HO}_2^\bullet + \text{H} = \text{H}_2 + \text{O}_2$, $\text{H} + \text{O}_2(+\text{M}) = \text{HO}_2^\bullet(+\text{M})$ и $\text{H} + \text{OH}^\bullet + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$, которые приводят к уменьшению скорости распространения пламени (рис. 4). А наиболее важными реакциями, которые приводят к увеличению скорости распространения пламени, являются реакции разветвления и продолжения цепи: $\text{HO}_2^\bullet + \text{H} = \text{OH}^\bullet + \text{OH}^\bullet$, $\text{OH}^\bullet + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$, $\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}^\bullet$ и $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}^\bullet$. Сходные результаты для пламен $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$ других составов были получены с помощью численного моделирования в работах [35–37].

Приведенные на рис. 5 профили скоростей наиболее важных элементарных стадий, а также температуры в свободно распространяющемся пламени того же состава в общем находятся в со-

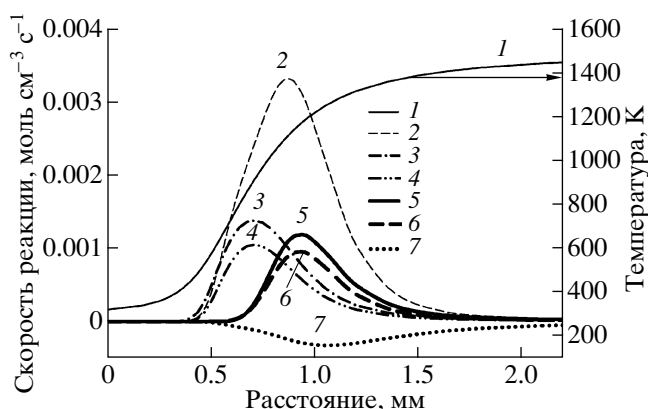


Рис. 5. Профили температуры и скоростей наиболее важных элементарных реакций в пламени с $\phi = 1.1$, $D = 0.09$: 1 – температура, 2 – $\text{OH}^\bullet + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$, 3 – $\text{H} + \text{O}_2(+\text{M}) = \text{HO}_2^\bullet(+\text{M})$, 4 – $\text{HO}_2^\bullet + \text{H} = \text{OH}^\bullet + \text{OH}^\bullet$, 5 – $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}^\bullet$, 6 – $\text{O} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{OH}^\bullet$, 7 – $\text{H}_2\text{O} + \text{M} = \text{H} + \text{OH}^\bullet + \text{M}$.

ответствии с данными анализа чувствительности скорости распространения пламени к константам скорости стадий.

Таким образом, в данной работе в пламенах с различным коэффициентом избытка горючего при давлении 1 атм впервые методом зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии с мягкой ионизацией электронным ударом были измерены профили концентраций Н и OH^\bullet . Измеренные в работе высокие концентрации промежуточных частиц непосредственно указывают на разветвленно-цепной характер реакций в атмосферном пламени водорода. Сопоставление полученных экспериментальных данных с результатами численного моделирования структуры пламен с использованием трех различных механизмов горения водорода показало хорошее согласие. Продemonстрировано, что метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии может найти применение для детектирования атомов и радикалов при исследовании процессов воспламенения и горения при атмосферном давлении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семенов Н.Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: Изд-во АН СССР, 1958.
2. Налбандян А.В., Воеводский В.В. Механизм окисления и горения водорода. М.–Л.: Изд-во АН СССР, 1949.
3. Азатян В.В. Дис. ... докт. хим. наук. Новые закономерности в газофазных РЦП. М.: ИХФ АН СССР, 1978.

4. Петрова Л.Д., Баратов А.Н., Азатян В.В., Каганова З.И., Макеев В.И. Горение и взрыв. М.: Наука, 1976. С. 526.
5. Иванова А.Н., Андрианова З.С., Азатян В.В. // Хим. физика. 1998. Т. 17. № 8. С. 91.
6. Азатян В.В., Андрианова З.С., Иванова А.Н. // Журн. физ. химии. 2006. Т. 80. № 7. С. 1194.
7. Li J., Zhao Z., Kazakov A., Dryer F.L. // Int. J. Chem. Kinet. 2004. V. 36. P. 566.
8. Conaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K. // Int. J. Chem. Kinet. 2004. V. 36. P. 603.
9. Коннов А.А. // Хим. физика. 2004. Т. 23. № 8. С. 5.
10. Zsély I.Gy., Zádor J., Turányi T. // Proc. Combust. Inst. 2005. V. 30. P. 1273.
11. Davis A.G., Joshi A.V., Wang H., Egolfopoulos F. // Proc. Combust. Inst. 2005. V. 30. P. 1283.
12. Del Alamo G., Williams F.A., Sanchez A.L. // Combust. Sci. Technol. 2004. V. 176. P. 1599.
13. Saxena P., Williams F.A. // Combust. Flame. 2006. V. 145. P. 316.
14. Eltenton G.C. // J. Chem. Phys. 1942. V. 9. P. 403.
15. Foner S., Hudson R. // J. Chem. Phys. 1954. V. 21. P. 1317.
16. Bascombe K.N. // Proc. Combust. Inst. 1965. V. 10. P. 55.
17. Александров Е.Н., Кузнецов Н.М., Козлов С.Н. // Физика горения и взрыва. 2007. Т. 43. № 5. С. 44.
18. Brown N.J., Eberius K.H., Fristrom R.M., Hoyer-mann K.H., Wagner H.G. // Combust. Flame. 1978. V. 33. P. 151.
19. Vandooren J., Bian J. // Proc. Combust. Inst. 1990. V. 23. P. 839.
20. Коробейничев О.П., Шварцберг В.М., Ильин С.Б., Чернов А.А., Большова Т.А. // Физика горения и взрыва. 1999. Т. 35. № 3. С. 29.
21. Dixon-Lewis G., Sutton M.M., Williams A. // Proc. Combust. Inst. 1965. V. 10. P. 495.
22. Dixon-Lewis G., Sutton M.M., Williams A. // Proc. Roy. Soc. London. 1970. V. A 317. P. 227.
23. Палецкий А.А., Куйбида Л.В., Большова Т.А., Коробейничев О.П., Фристром Р.М. // Физика горения и взрыва. 1996. Т. 32. № 3. С. 3.
24. De Goeij L.P.H., Van Maaren A., Quax R.M. // Combust. Sci. Technol. 1993. V. 92. P. 201.
25. Van Maaren A., Thung D.S., de Goeij L.P.H. // Combust. Sci. Technol. 1994. V. 96. P. 327.
26. Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A. // Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009. 1989.
27. Kee R.J., Grcar J.F., Smooke M.D., Miller J.A. // Sandia National Laboratories Report, SAND85-8240. 1992.
28. Lutz A.E., Kee R.J., Miller J.A. // Sandia National Laboratories Report, SAND87-8248, 1990.
29. Коробейничев О.П., Терещенко А.Г., Емельянов И.Д. // Препр. № 14. Новосибирск: ИХКИГ ИТПМ НГУ, 1985.
30. Korobeinichev O.P., Ilyin S.B., Shvartsberg V.M., Chernov A.A. // Combust. Flame. 1999. V. 118. № 4. P. 718.
31. Warnatz J. // Combust. Sci. Technol. 1981. V. 26. P. 203.
32. Korobeinichev O.P., Shvartsberg V.M., Chernov A.A. // Combust. Flame. 1999. V. 118. № 4. P. 727.
33. Baulch D.L., Bowman C.T., Cobos C.J., Cox R.A., Just Th., Kerr J.A., Pilling M.J., Stocker D., Troe J., Tsang W., Walker R.W., Warnatz J. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2005. V. 34. № 3. P. 757.
34. Konnov A.A. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. Release 0.5 <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>, 2000.
35. Marinov N.M., Westbrook C.K., Pitz W.J. // 8th Int. Symp. on Transport Properties. San Francisco, CA, 1995.
36. Dong Y., Holley A.T., Andac M.G., Egolfopoulos F.N., Davis S.G., Middha P., Wang H. // Combust. Flame. 2005. V. 142. № 4. P. 374.
37. Egolfopoulos F.N., Law C.K. // Proc. Combust. Inst. 1990. V. 23. P. 333.