

ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 541.126

МЕХАНИЗМЫ ОКИСЛЕНИЯ И ГОРЕНИЯ НОРМАЛЬНЫХ
ПАРАФИНОВЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ:
ПЕРЕХОД ОТ C_1 – C_7 К C_8H_{18} , C_9H_{20} И $C_{10}H_{22}$

© 2011 г. В. Я. Басевич*, А. А. Беляев, С. Н. Медведев,
В. С. Посвянский, С. М. Фролов

Учреждение *Институт химической физики им. Н.Н. Семенова*
Российской академии наук, Москва

*E-mail: basevich@center.chph.ras.ru

Поступила в редакцию 02.03.2011

В настоящее время для высших углеводородов предлагаются детальные кинетические механизмы (ДКМ), содержащие сотни частиц и тысячи реакций. Такие ДКМ имеют ряд несомненных достоинств, так как претендуют на описание широкого класса явлений. Однако их применение, например, для моделирования турбулентного горения затруднено ввиду чрезвычайной громоздкости. К тому же они в определенной степени ограничены и не могут считаться всеобъемлющими. В качестве альтернативы таким ДКМ в работе строится не максимальный, а оптимальный механизм высоко- и низкотемпературного окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов. В соответствии с предложенным ранее алгоритмом такой механизм включает лишь главные процессы, определяющие скорость реакции и образование основных промежуточных и конечных продуктов. Такой механизм имеет статус неэмпирического ДКМ, так как все входящие в него элементарные реакции имеют кинетическое обоснование. Механизм имеет две особенности: в нем 1) отсутствуют реакции так называемого двойного присоединения кислорода (сначала к алкильному радикалу, а затем к изомеризованной форме образовавшегося перекисного радикала), поскольку первое присоединение считается достаточным; 2) не рассматриваются в качестве промежуточных частиц изомерные соединения и их производные, поскольку этот путь окисления медленнее, чем через молекулы и радикалы нормального строения. Применение алгоритма приводит к достаточно компактному механизму, что важно для моделирования химических процессов с участием парафиновых углеводородов C_n с большим n . Ранее это было сделано для пропана, н-бутана, н-пентана, н-гексана и н-гептана, а в данной статье – для н-октана, н-нонана и н-декана. Важнейшая особенность всех механизмов – проявление стадийности в виде холодных и голубых пламен при низкотемпературном самовоспламенении. Проведено прямое сравнение результатов расчетов и опытов.

Ключевые слова: углеводороды нормальные парафиновые, механизмы окисления, горение.

Для высших углеводородов с учетом многообразия промежуточных стабильных молекул и радикалов в реакциях их окисления и горения, в настоящее время предлагаются детальные кинетические механизмы (ДКМ), содержащие сотни частиц и тысячи реакций. Например, в [1] для н-гептана представлена схема, содержащая 650 компонентов и 2300 реакций, а в [2, 3] для н-декана – схема с 715 компонентами и 3872 реакциями. Такие ДКМ имеют ряд несомненных достоинств, так как претендуют на описание широкого класса явлений. Вместе с тем их возможности не следует преувеличивать. Во-первых, их применение, например, для моделирования турбулентного горения затруднено ввиду чрезвычайной громоздкости. Во-вторых, простой подсчет показывает, что если учесть все возможные изомеры и все реакции между всеми компонентами (например, учесть

реакции образования и расходования полиароматических углеводородов, сажи, фуллеренов и т.д.), то объемы механизмов станут значительно больше, чем в [1–3]. Следовательно, известные ДКМ в определенной степени ограничены и не могут считаться всеобъемлющими. В-третьих, ни один из известных ДКМ не предсказывает образование и холодных, и голубых пламен перед самовоспламенением, хотя адекватное описание низкотемпературного многостадийного окисления углеводородов [4] – одно из важных требований, предъявляемых к таким механизмам. В-четвертых, ввиду отсутствия многих необходимых и проверенных данных по термодинамике и скоростям реакций такие ДКМ часто недостаточно обоснованы и точны.

Между тем для решения конкретных задач представляют интерес вовсе не максимальные, а

оптимальные механизмы, в которых учтены лишь главные процессы, определяющие скорость реакции и образование основных промежуточных и конечных продуктов. Такие механизмы, даже если они достаточно компактны, имеют статус ДКМ, поскольку все их элементарные реакции кинетически обоснованы. Таким образом, для моделирования окисления и горения углеводородов нужен метод неэкстенсивного построения ДКМ с ограничением многообразия продуктов и реакций, но с сохранением основных каналов процесса и принципиально важных типов элементарных актов.

Подход, используемый в данной статье, основан на большой общности в феноменологии окисления парафиновых углеводородов [4, 5]. В [6] этот подход был реализован в виде алгоритма автоматического построения ДКМ, который в дальнейшем был применен для построения механизмов окисления и горения и пропана [7], н-бутана [6], н-пентана [8], н-гексана [9] и н-гептана [10]. В данной статье алгоритм [6] использован для построения механизмов окисления и горения н-октана (C_8H_{18}), н-нонана (C_9H_{20}) и н-декана ($C_{10}H_{22}$). В алгоритм заложен принцип неэкстенсивного построения ДКМ, который имеет две особенности: предполагается, что 1) низкотемпературное разветвление описывается группой реакций с одним присоединением кислорода и 2) путь окисления через изомеры может быть исключен, поскольку он медленнее, чем путь окисления через неизомеризованные реагенты.

Подчеркнем, что механизмы окисления $C_{10}H_{22}$ в литературе уже предлагались (см., например, [2]). Однако, как уже отмечалось выше, при описании многостадийного низкотемпературного самовоспламенения они, в частности, не обнаруживают существование голубого пламени, которое неоднократно наблюдалось экспериментально. Построение механизма окисления $C_{10}H_{22}$, основанного на принципе неэкстенсивности, необходимо и важно для дальнейшего получения по этому принципу ДКМ окисления более сложных углеводородов C_n . Одно из требований, предъявляемых нами к таким механизмам, — проявление стадийности в виде холодных и голубых пламен при низкотемпературном самовоспламенении.

ПОСТРОЕНИЕ МЕХАНИЗМА

В соответствии с алгоритмом [6] для разработки ДКМ окисления углеводорода C_nH_{2n+2} за основу берется механизм его аналога в гомологическом ряду с числом атомов углерода n , меньшим на единицу: $C_{(n-1)}H_{2(n-1)+2}$. Это относится и к реагентам, и к реакциям. Для н-октана C_8H_{18} предыдущий аналог в гомологическом ряду — н-гептан.

Поэтому за основу построения механизма окисления и горения C_8 взят механизм окисления и горения C_1-C_7 [10]. Он включает 81 компонент и 623 реакции. В механизм н-октана по сравнению с механизмом н-гептана потребовалось ввести 9 новых компонентов и 140 новых элементарных актов, так что полный объем октанового механизма — 90 компонентов и 763 реакции. Соответствующий объем для нонанового механизма — 99 компонентов и 915 реакций, а для деканового механизма — 108 компонентов и 1083 реакции.

Компьютерная программа [6] отбирает и новые компоненты (табл. 1), и новые реакции с их аррениусовскими параметрами (табл. 2). В табл. 1 кроме новых компонентов указаны значения их энтальпий образования ΔH_{298}° , а также энтропии S_{298}° и теплоемкости $c_p = c_0 + c_1 T/10^3 + c_2 T^2/10^6 + c_3 T^3/10^9$ при постоянном давлении.

Известно, что критические явления в химической кинетике воспроизводятся лишь при определенном соотношении скоростей разных элементарных актов. Поэтому при моделировании таких явлений простая подстановка приближенных значений определяющих констант скоростей не всегда приводит к цели: требуются дополнительный анализ и подбор констант скоростей (разумеется, в допустимом теорией диапазоне значений, не превосходящих экспериментальную погрешность).

Возникновение холодного или голубого пламени при низкотемпературном самовоспламенении парафиновых углеводородов — один из ярких примеров таких критических явлений. По причине, указанной выше, потребовалась корректировка полученных ДКМ применительно к ограниченному числу реакций — реакций углеводородов с гидроперекисными радикалами и реакции алкильного радикала с молекулярным кислородом.

ПРОВЕРКА МЕХАНИЗМА

Опыты по самовоспламенению газовых смесей

Полученный ДКМ проверили по литературным данным, касающимся гомогенного самовоспламенения смесей $C_{10}H_{22}$ с воздухом. Подходящих экспериментов по н- C_8H_{18} и н- C_9H_{20} в литературе не нашли. Как и в [6], для расчетов применяли стандартную кинетическую программу.

На рис. 1 для примера представлены типичные расчетные зависимости температуры от времени при самовоспламенении н-декановоздушной смеси, характерные для низких и повышенных начальных температур. Первый ступенчатый подъем для относительно низкой начальной температуры $T_0 = 588$ К при $t \sim 1.27$ с связан с возникновением холодного пламени. Далее, по истечении времени около 0.28 с возникает голубое пла-

Таблица 1. Реагенты механизма окисления и горения н-октана, н-нонана и н-декана

| Номер компонента | Формула | ΔH_f^{298} кал/моль | S_{298}^0 кал/моль · К | c_0 | c_1 | c_2 | c_3 |
|------------------|--|--------------------------------|-----------------------------|-----------|-----------|------------|------------|
| 84 | C ₈ H ₁₈ | -0.495E+05 | 0.112E+03 | 0.825E+00 | 0.180E+03 | -0.981E+02 | 0.208E+02 |
| 85 | C ₈ H ₁₇ | -0.126E+04 | 0.116E+03 | 0.246E+01 | 0.171E+03 | -0.959E+02 | 0.232E+02 |
| 86 | C ₈ H ₁₇ O ₂ | -0.289E+05 | 0.134E+03 | 0.329E+01 | 0.196E+03 | -0.117E+03 | 0.319E+02 |
| 87 | C ₈ H ₁₇ O ₂ H | -0.646E+05 | 0.133E+03 | 0.297E+01 | 0.199E+03 | -0.117E+03 | 0.313E+02 |
| 88 | C ₈ H ₁₇ O | -0.311E+05 | 0.125E+03 | 0.572E+00 | 0.195E+03 | -0.119E+03 | 0.340E+02 |
| 89 | C ₇ H ₁₅ CHO | -0.698E+05 | 0.120E+03 | 0.115E+02 | 0.130E+03 | -0.187E+02 | -0.325E+02 |
| 90 | C ₇ H ₁₅ CO | -0.346E+05 | 0.121E+03 | 0.115E+02 | 0.130E+03 | -0.187E+02 | -0.325E+02 |
| 91 | C ₈ H ₁₆ | -0.197E+05 | 0.111E+03 | 0.276E+01 | 0.163E+03 | -0.879E+02 | 0.184E+02 |
| 92 | C ₈ H ₁₅ | 0.243E+05 | 0.110E+03 | 0.337E+01 | 0.149E+03 | -0.767E+02 | 0.152E+02 |
| 93 | C ₉ H ₂₀ | -0.544E+05 | 0.121E+03 | 0.122E+01 | 0.201E+03 | -0.110E+03 | 0.234E+02 |
| 94 | C ₉ H ₁₉ | -0.619E+04 | 0.125E+03 | 0.285E+01 | 0.192E+03 | -0.107E+03 | 0.258E+02 |
| 95 | C ₉ H ₁₉ O ₂ | -0.338E+05 | 0.143E+03 | 0.368E+01 | 0.218E+03 | -0.129E+03 | 0.345E+02 |
| 96 | C ₉ H ₁₉ O ₂ H | -0.695E+05 | 0.142E+03 | 0.336E+01 | 0.220E+03 | -0.129E+03 | 0.339E+02 |
| 97 | C ₉ H ₁₉ O | -0.360E+05 | 0.134E+03 | 0.967E+00 | 0.217E+03 | -0.131E+03 | 0.366E+02 |
| 98 | C ₈ H ₁₇ CHO | -0.747E+05 | 0.130E+03 | 0.119E+02 | 0.152E+03 | -0.307E+02 | -0.299E+02 |
| 99 | C ₈ H ₁₇ CO | -0.395E+05 | 0.131E+03 | 0.119E+02 | 0.152E+03 | -0.307E+02 | -0.295E+02 |
| 100 | C ₉ H ₁₈ | -0.247E+05 | 0.121E+03 | 0.315E+01 | 0.184E+03 | -0.999E+02 | 0.209E+02 |
| 101 | C ₉ H ₁₇ | 0.194E+05 | 0.120E+03 | 0.376E+01 | 0.170E+03 | -0.887E+02 | 0.178E+02 |
| 102 | C ₁₀ H ₂₂ | -0.593E+05 | 0.131E+03 | 0.161E+01 | 0.222E+03 | -0.122E+03 | 0.260E+02 |
| 103 | C ₁₀ H ₂₁ | -0.111E+05 | 0.135E+03 | 0.325E+01 | 0.213E+03 | -0.119E+03 | 0.284E+02 |
| 104 | C ₁₀ H ₂₁ O ₂ | -0.388E+05 | 0.153E+03 | 0.408E+01 | 0.239E+03 | -0.141E+03 | 0.371E+02 |
| 105 | C ₁₀ H ₂₁ O ₂ H | -0.745E+05 | 0.152E+03 | 0.376E+01 | 0.242E+03 | -0.141E+03 | 0.365E+03 |
| 106 | C ₁₀ H ₂₁ O | -0.410E+05 | 0.144E+03 | 0.136E+01 | 0.238E+03 | -0.143E+03 | 0.392E+02 |
| 107 | C ₉ H ₁₉ CHO | -0.797E+05 | 0.139E+03 | 0.123E+02 | 0.173E+03 | -0.426E+02 | -0.273E+02 |
| 108 | C ₉ H ₁₉ CO | -0.445E+05 | 0.140E+03 | 0.123E+02 | 0.173E+03 | -0.426E+02 | -0.273E+02 |
| 109 | C ₁₀ H ₂ O | -0.296E+05 | 0.130E+03 | 0.355E+01 | 0.205E+03 | -0.111E+03 | 0.235E+02 |
| 110 | C ₁₀ H ₁₉ | 0.144E+05 | 0.129E+03 | 0.416E+01 | 0.192E+03 | -0.100E+03 | 0.204E+02 |

мя (хорошо видно при изменении масштаба времени на рис. 2), а затем — приблизительно в момент времени 1.57 с — горячее пламя, и температура возрастает до 2500 К и выше.

Так проявляется многостадийность самовоспламенения — последовательное появление холодного, голубого и горячего пламен. Ускорение реакции в холодном пламени — следствие разветвления при распаде алкилгидроперекиси

(здесь — алкилгидроперекиси C₁₀H₂₁O₂H) с образованием гидроксила и оксирадикала. Возникновение голубого пламени — следствие разветвления из-за распада перекиси водорода H₂O₂. Это отчетливо видно на рис. 2 по расчетным кинетическим кривым для перекисей и по двум пикам концентрации гидроксила. В экспериментах по регистрации давления такое разделение стадий может не всегда обнаруживаться вследствие тем-

Таблица 2. Механизм окисления и горения *n*-октана, *n*-нонана и *n*-декана

| № п.п. | Реакция | <i>A</i> , л, моль, с | <i>E/R</i> , К |
|-----------------------|---|-----------------------|----------------|
| <i>n</i>-Декан | | | |
| 1 | $C_{10}H_{22} + O_2 = C_{10}H_{21} + HO_2$ | 0.400E+10 | 0.239E+05 |
| 2 | $C_{10}H_{22} + OH = C_{10}H_{21} + H_2O$ | 0.630E+10 | 0.600E+03 |
| 3 | $C_{10}H_{22} + H = C_{10}H_{21} + H_2$ | 0.930E+11 | 0.403E+04 |
| 4 | $C_{10}H_{22} + O = C_{10}H_{21} + OH$ | 0.506E+12 | 0.483E+04 |
| 5 | $C_{10}H_{22} + HO_2 = C_{10}H_{21} + H_2O_2$ | 0.600E+09 | 0.856E+04 |
| 6 | $C_{10}H_{20} + H = C_{10}H_{21}$ | 0.189E+10 | 0.315E+03 |
| 7 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_{10}H_{20} + HO_2$ | 0.300E+11 | 0.700E+04 |
| 8 | $C_{10}H_{21} + OH = C_{10}H_{20} + H_2O$ | 0.600E+10 | 0.000E+00 |
| 9 | $C_{10}H_{22} = H + C_{10}H_{21}$ | 0.359E+14 | 0.376E+05 |
| 10 | $C_{10}H_{22} = CH_3 + C_9H_{19}$ | 0.404E+16 | 0.421E+05 |
| 11 | $C_{10}H_{22} = C_2H_5 + C_8H_{17}$ | 0.195E+17 | 0.428E+05 |
| 12 | $C_{10}H_{22} = C_3H_7 + C_7H_{15}$ | 0.158E+17 | 0.428E+05 |
| 13 | $C_{10}H_{22} = C_4H_9 + C_6H_{13}$ | 0.158E+17 | 0.428E+05 |
| 14 | $C_{10}H_{22} = C_5H_{11} + C_5H_{11}$ | 0.158E+17 | 0.428E+05 |
| 15 | $C_{10}H_{21} + H = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.600E+10 | 0.000E+00 |
| 16 | $C_{10}H_{21} + CH_3 = C_{10}H_{20} + CH_4$ | 0.351E+09 | -0.106E+03 |
| 17 | $C_{10}H_{21} + C_2H_5 = C_{10}H_{20} + C_2H_6$ | 0.158E+11 | 0.466E+03 |
| 18 | $C_{10}H_{21} + C_3H_7 = C_{10}H_{20} + C_3H_8$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 19 | $C_{10}H_{21} + C_4H_9 = C_{10}H_{20} + C_4H_{10}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 20 | $C_{10}H_{21} + C_5H_{11} = C_{10}H_{20} + C_5H_{12}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 21 | $C_{10}H_{21} + C_6H_{13} = C_{10}H_{20} + C_6H_{14}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 22 | $C_{10}H_{21} + C_7H_{15} = C_{10}H_{20} + C_7H_{16}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 23 | $C_{10}H_{21} + C_8H_{17} = C_{10}H_{20} + C_8H_{18}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 24 | $C_{10}H_{21} + C_9H_{19} = C_{10}H_{20} + C_9H_{20}$ | 0.203E+10 | 0.243E+03 |
| 25 | $C_{10}H_{21} + O = C_{10}H_{20} + OH$ | 0.200E+12 | 0.000E+00 |
| 26 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_{10}H_{21}O_2$ | 0.398E+08 | -0.500E+03 |
| 27 | $C_{10}H_{22} + CH_3O_2 = C_{10}H_{21} + CH_3O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 28 | $C_{10}H_{22} + C_2H_5O_2 = C_{10}H_{21} + C_2H_5O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 29 | $C_{10}H_{22} + C_3H_7O_2 = C_{10}H_{21} + C_3H_7O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 30 | $C_{10}H_{22} + C_4H_9O_2 = C_{10}H_{21} + C_4H_9O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 31 | $C_{10}H_{22} + C_5H_{11}O_2 = C_{10}H_{21} + C_5H_{11}O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 32 | $C_{10}H_{22} + C_6H_{13}O_2 = C_{10}H_{21} + C_6H_{13}O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 33 | $C_{10}H_{22} + C_7H_{15}O_2 = C_{10}H_{21} + C_7H_{15}O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 34 | $C_{10}H_{22} + C_8H_{17}O_2 = C_{10}H_{21} + C_8H_{17}O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 35 | $C_{10}H_{22} + C_9H_{19}O_2 = C_{10}H_{21} + C_9H_{19}O_2H$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 36 | $C_{10}H_{22} + C_{10}H_{21}O_2 = C_{10}H_{21} + C_{10}H_{21}O_2$ | 0.245E+11 | 0.650E+04 |
| 37 | $C_{10}H_{22}O_2 = C_{10}H_{21}O + OH$ | 0.500E+16 | 0.200E+05 |
| 38 | $C_{10}H_{21}O = H_2CO + C_9H_{19}$ | 0.159E+15 | 0.797E+04 |
| 39 | $C_{10}H_{21}O = CH_3CHO + C_8H_{17}$ | 0.314E+15 | 0.113E+05 |
| 40 | $C_{10}H_{21}O = C_2H_5CHO + C_7H_{15}$ | 0.305E+15 | 0.103E+05 |
| 41 | $C_{10}H_{21}O = C_4H_8O + C_6H_{13}$ | 0.304E+15 | 0.103E+05 |
| 42 | $C_{10}H_{21}O = C_5H_{10}O + C_5H_{11}$ | 0.304E+15 | 0.103E+05 |
| 43 | $C_{10}H_{21}O = C_6H_{12}O + C_4H_9$ | 0.304E+15 | 0.103E+05 |
| 44 | $C_{10}H_{21}O = C_7H_{14}O + C_3H_7$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 45 | $C_{10}H_{21}O = C_8H_{16}O + C_2H_5$ | 0.374E+15 | 0.103E+05 |
| 46 | $C_{10}H_{21}O = C_9H_{18}O + CH_3$ | 0.775E+14 | 0.108E+05 |
| 47 | $C_{10}H_{21}O = C_{10}H_{20}O + H$ | 0.688E+12 | 0.626E+04 |
| 48 | $C_{10}H_{21}O_2 + H = C_{10}H_{21}O + OH$ | 0.236E+11 | -0.161E+04 |
| 49 | $C_{10}H_{21}O_2 + CH_3 = C_{10}H_{21}O + CH_3O$ | 0.364E+09 | -0.166E+03 |
| 50 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_2H_5 = C_{10}H_{21}O + C_2H_5O$ | 0.827E+09 | -0.649E+03 |
| 51 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_3H_7 = C_{10}H_{21}O + C_3H_7O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 52 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_4H_9 = C_{10}H_{21}O + C_4H_9O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|--------|---|---------------|------------|
| 53 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_5H_{11} = C_{10}H_{21}O + C_5H_{11}O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 54 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_6H_{13} = C_{10}H_{21}O + C_6H_{13}O$ | 0.629E+09 | 0.000E+00 |
| 55 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_7H_{15} = C_{10}H_{21}O + C_7H_{15}O$ | 0.627E+09 | 0.000E+00 |
| 56 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_8H_{17} = C_{10}H_{21}O + C_8H_{17}O$ | 0.627E+09 | 0.000E+00 |
| 57 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_9H_{19} = C_{10}H_{21}O + C_9H_{19}O$ | 0.365E+09 | 0.156E+04 |
| 58 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_{10}H_{21} = C_{10}H_{21}O + C_{10}H_{21}O$ | 0.365E+09 | 0.156E+04 |
| 59 | $C_{10}H_{21}O_2 + H_2CO = C_{10}H_{22}O_2 + HCO$ | 0.320E+09 | 0.564E+04 |
| 60 | $C_{10}H_{21}O_2 + CH_3CHO = C_{10}H_{22}O_2 + CH_3CO$ | 0.315E+09 | 0.560E+04 |
| 61 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_2H_5CHO = C_{10}H_{22}O_2 + C_2H_5CO$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 62 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_4H_8O = C_{10}H_{22}O_2 + C_4H_7O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 63 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_5H_{10}O = C_{10}H_{22}O_2 + C_5H_9O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 64 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_6H_{12}O = C_{10}H_{22}O_2 + C_6H_{11}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 65 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_7H_{14}O = C_{10}H_{22}O_2 + C_7H_{13}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 66 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_8H_{16}O = C_{10}H_{22}O_2 + C_8H_{15}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 67 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_9H_{18}O = C_{10}H_{22}O_2 + C_9H_{17}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 68 | $C_{10}H_{21}O_2 + C_{10}H_{20}O = C_{10}H_{22}O_2 + C_{10}H_{19}O$ | 0.619E+11 | 0.289E+04 |
| 69 | $C_{10}H_{21} + HO_2 = C_{10}H_{21}O + OH$ | 0.298E+11 | 0.000E+00 |
| 70 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_{10}H_{20}O + OH$ | 0.398E+10 | 0.900E+04 |
| 71 | $C_{10}H_{21} + C_2H_5 = C_{10}H_{22} + C_2H_4$ | 0.625E+09 | 0.335E+03 |
| 72 | $C_{10}H_{21} + C_3H_7 = C_{10}H_{22} + C_3H_6$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 73 | $C_{10}H_{21} + C_4H_9 = C_{10}H_{22} + C_4H_8$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 74 | $C_{10}H_{21} + C_5H_{11} = C_{10}H_{22} + C_5H_{10}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 75 | $C_{10}H_{21} + C_6H_{13} = C_{10}H_{22} + C_6H_{12}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 76 | $C_{10}H_{21} + C_7H_{15} = C_{10}H_{22} + C_7H_{14}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 77 | $C_{10}H_{21} + C_8H_{17} = C_{10}H_{22} + C_8H_{16}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 78 | $C_{10}H_{21} + C_9H_{19} = C_{10}H_{22} + C_9H_{18}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 79 | $C_{10}H_{21} + C_{10}H_{21} = C_{10}H_{22} + C_{10}H_{20}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 80 | $C_{10}H_{21} + O_2 = H_2CO + C_9H_{19}O$ | 0.368E+09 | 0.565E+04 |
| 81 | $C_{10}H_{21} + O_2 = CH_3CHO + C_8H_{17}O$ | 0.725E+09 | 0.454E+04 |
| 82 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_2H_5CHO + C_7H_{15}O$ | 0.703E+09 | 0.446E+04 |
| 83 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_4H_8O + C_6H_{13}O$ | 0.705E+09 | 0.446E+04 |
| 84 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_5H_{10}O + C_5H_{11}O$ | 0.706E+09 | 0.446E+04 |
| 85 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_6H_{12}O + C_4H_9O$ | 0.705E+09 | 0.446E+04 |
| 86 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_7H_{14}O + C_3H_7O$ | 0.703E+09 | 0.446E+04 |
| 87 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_8H_{16}O + C_2H_5O$ | 0.114E+10 | 0.382E+04 |
| 88 | $C_{10}H_{21} + O_2 = C_9H_{18}O + CH_3O$ | 0.104E+09 | 0.453E+04 |
| 89 | $C_{10}H_{21} + OH = CH_3 + C_9H_{19}O$ | 0.184E+11 | -0.194E+04 |
| 90 | $C_{10}H_{21} + OH = C_2H_5 + C_8H_{17}O$ | 0.888E+11 | 0.417E+03 |
| 91 | $C_{10}H_{21} + OH = C_3H_7 + C_7H_{15}O$ | 0.719E+11 | 0.413E+03 |
| 92 | $C_{10}H_{21} + OH = C_4H_9 + C_6H_{13}O$ | 0.720E+11 | 0.413E+03 |
| 93 | $C_{10}H_{21} + OH = C_5H_{11} + C_5H_{11}O$ | 0.721E+11 | 0.413E+03 |
| 94 | $C_{10}H_{21} + OH = C_6H_{13} + C_4H_9O$ | 0.721E+11 | 0.413E+03 |
| 95 | $C_{10}H_{21} + OH = C_7H_{15} + C_3H_7O$ | 0.722E+11 | 0.413E+03 |
| 96 | $C_{10}H_{21} + OH = C_8H_{17} + C_2H_5O$ | 0.117E+12 | -0.232E+03 |
| 97 | $C_{10}H_{21} + OH = C_9H_{19} + CH_3O$ | 0.107E+11 | 0.480E+03 |
| 98 | $C_{10}H_{21} + H = CH_3 + C_9H_{19}$ | 0.388E+11 | 0.546E+03 |
| 99 | $C_{10}H_{21} + H = C_2H_5 + C_8H_{17}$ | 0.187E+12 | 0.318E+03 |
| 100 | $C_{10}H_{21} + H = C_3H_7 + C_7H_{15}$ | 0.152E+12 | 0.314E+03 |
| 101 | $C_{10}H_{21} + H = C_4H_9 + C_6H_{13}$ | 0.151E+12 | 0.314E+03 |
| 102 | $C_{10}H_{21} + H = C_5H_{11} + C_5H_{11}$ | 0.151E+12 | 0.314E+03 |
| 103 | $C_{10}H_{21} + H = CH_2 + C_9H_{20}$ | 0.423E+08 | 0.302E+04 |
| 104 | $C_{10}H_{21} + H = C_2H_4 + C_8H_{18}$ | 0.723E+07 | -0.641E+04 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|--------|---|---------------|------------|
| 105 | $C_{10}H_{21} + H = C_3H_6 + C_7H_{16}$ | 0.178E+08 | -0.675E+04 |
| 106 | $C_{10}H_{21} + H = C_4H_8 + C_6H_{14}$ | 0.178E+08 | -0.675E+04 |
| 107 | $C_{10}H_{21} + H = C_5H_{10} + C_5H_{12}$ | 0.178E+08 | -0.675E+04 |
| 108 | $C_{10}H_{21} + H = C_6H_{12} + C_4H_{10}$ | 0.178E+08 | -0.675E+04 |
| 109 | $C_{10}H_{21} + H = C_7H_{14} + C_3H_8$ | 0.178E+08 | -0.675E+04 |
| 110 | $C_{10}H_{21} + H = C_8H_{16} + C_2H_6$ | 0.252E+10 | -0.677E+04 |
| 111 | $C_{10}H_{21} + H = C_9H_{18} + CH_4$ | 0.116E+08 | -0.711E+04 |
| 112 | $C_{10}H_{21} + O = H + C_{10}H_{20}O$ | 0.699E+09 | 0.565E+03 |
| 113 | $C_{10}H_{21} + O = CH_3 + C_9H_{18}O$ | 0.787E+11 | -0.952E+03 |
| 114 | $C_{10}H_{21} + O = C_2H_5 + C_8H_{16}O$ | 0.380E+12 | -0.118E+04 |
| 115 | $C_{10}H_{21} + O = C_3H_7 + C_7H_{14}O$ | 0.308E+12 | -0.118E+04 |
| 116 | $C_{10}H_{21} + O = C_4H_9 + C_6H_{12}O$ | 0.308E+12 | -0.118E+04 |
| 117 | $C_{10}H_{21} + O = C_5H_{11} + C_5H_{10}O$ | 0.309E+12 | -0.118E+04 |
| 118 | $C_{10}H_{21} + O = C_6H_{13} + C_4H_8O$ | 0.309E+12 | -0.118E+04 |
| 119 | $C_{10}H_{21} + O = C_7H_{15} + C_2H_5CHO$ | 0.309E+12 | -0.118E+04 |
| 120 | $C_{10}H_{21} + O = C_8H_{17} + CH_3CHO$ | 0.319E+12 | -0.111E+04 |
| 121 | $C_{10}H_{21} + O = C_9H_{19} + H_2CO$ | 0.162E+12 | -0.352E+01 |
| 122 | $C_{10}H_{19}O + HO_2 = C_{10}H_{20}O + O_2$ | 0.530E+08 | 0.000E+00 |
| 123 | $C_{10}H_{20}O + OH = C_{10}H_{19}O + H_2O$ | 0.100E+11 | 0.000E+00 |
| 124 | $C_{10}H_{20}O + H = C_{10}H_{19}O + H_2$ | 0.140E+11 | 0.165E+04 |
| 125 | $C_{10}H_{20}O + O = C_{10}H_{19}O + OH$ | 0.568E+10 | 0.780E+03 |
| 126 | $C_{10}H_{20}O + HO_2 = C_{10}H_{19}O + H_2O_2$ | 0.600E+09 | 0.500E+04 |
| 127 | $C_9H_{19} + HCO = C_{10}H_{20}O$ | 0.222E+11 | 0.352E+01 |
| 128 | $C_9H_{19} + CO = C_{10}H_{19}O$ | 0.186E+09 | 0.242E+04 |
| 129 | $C_{10}H_{19}O + H = C_9H_{19} + HCO$ | 0.487E+10 | 0.240E+04 |
| 130 | $C_{10}H_{19}O + O = C_9H_{19}O + CO$ | 0.369E+10 | 0.646E+03 |
| 131 | $C_{10}H_{20} + OH = C_{10}H_{19} + H_2O$ | 0.900E+11 | 0.325E+04 |
| 132 | $C_{10}H_{19} + H_2 = C_{10}H_{20} + H$ | 0.853E+11 | 0.533E+04 |
| 133 | $C_{10}H_{19} + O_2 = C_8H_{17}O_2 + C_2H_2$ | 0.241E+11 | 0.396E+04 |
| 134 | $C_{10}H_{20} + HCO = C_{10}H_{19} + H_2CO$ | 0.600E+11 | 0.900E+04 |
| 135 | $C_{10}H_{20} + CH_3 = C_{10}H_{19} + CH_4$ | 0.107E+09 | 0.268E+04 |
| 136 | $C_{10}H_{20} + C_2H_5 = C_{10}H_{19} + C_2H_6$ | 0.481E+10 | 0.325E+04 |
| 137 | $C_{10}H_{20} + C_3H_7 = C_{10}H_{19} + C_3H_8$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 138 | $C_{10}H_{20} + C_4H_9 = C_{10}H_{19} + C_4H_{10}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 139 | $C_{10}H_{20} + C_5H_{11} = C_{10}H_{19} + C_5H_{12}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 140 | $C_{10}H_{20} + C_6H_{13} = C_{10}H_{19} + C_6H_{14}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 141 | $C_{10}H_{20} + C_7H_{15} = C_{10}H_{19} + C_7H_{16}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 142 | $C_{10}H_{20} + C_8H_{17} = C_{10}H_{19} + C_8H_{18}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 143 | $C_{10}H_{20} + C_9H_{19} = C_{10}H_{19} + C_9H_{20}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 144 | $C_8H_{17} + C_2H_2 = C_{10}H_{19}$ | 0.141E+10 | 0.143E+04 |
| 145 | $C_{10}H_{20} = C_2H_3 + C_8H_{17}$ | 0.390E+14 | 0.379E+05 |
| 146 | $C_{10}H_{20} = C_3H_5 + C_7H_{15}$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 147 | $C_{10}H_{20} = C_4H_7 + C_6H_{13}$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 148 | $C_{10}H_{20} = C_5H_9 + C_5H_{11}$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 149 | $C_{10}H_{20} = C_6H_{11} + C_4H_9$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 150 | $C_{10}H_{20} = C_7H_{13} + C_3H_7$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 151 | $C_{10}H_{20} = C_8H_{15} + C_2H_5$ | 0.140E+14 | 0.446E+05 |
| 152 | $C_{10}H_{20} = C_9H_{17} + CH_3$ | 0.289E+13 | 0.439E+05 |
| 153 | $C_{10}H_{20} + O_2 = C_{10}H_{19} + HO_2$ | 0.600E+11 | 0.236E+05 |
| 154 | $C_{10}H_{20} + O = C_9H_{19} + HCO$ | 0.404E+10 | 0.226E+03 |
| 155 | $C_{10}H_{19} + OH = C_9H_{19} + HCO$ | 0.485E+10 | -0.352E+01 |
| 156 | $C_{10}H_{19} + H = C_8H_{18} + C_2H_2$ | 0.918E+10 | 0.362E+03 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|----------------|--|---------------|------------|
| 157 | $C_{10}H_{19} + O = C_9H_{19} + CO$ | 0.485E+10 | -0.352E+01 |
| 158 | $C_{10}H_{19} + O = C_8H_{17}O + C_2H_2$ | 0.403E+11 | -0.662E+02 |
| 159 | $CH_3 + C_9H_{19} = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.248E+14 | 0.191E+05 |
| 160 | $C_2H_5 + C_8H_{17} = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.512E+13 | 0.193E+05 |
| 161 | $C_3H_7 + C_7H_{15} = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.633E+13 | 0.193E+05 |
| 162 | $C_4H_9 + C_6H_{13} = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.634E+13 | 0.193E+05 |
| 163 | $C_5H_{11} + C_5H_{11} = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.634E+13 | 0.193E+05 |
| 164 | $C_6H_{13} + C_4H_9 = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.634E+13 | 0.193E+05 |
| 165 | $C_7H_{15} + C_3H_7 = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.633E+13 | 0.193E+05 |
| 166 | $C_8H_{17} + C_2H_5 = C_{10}H_{20} + H_2$ | 0.512E+13 | 0.193E+05 |
| 167 | $C_{10}H_{20} + H + H = CH_3 + C_9H_{19}$ | 0.356E+10 | -0.414E+04 |
| 168 | $C_{10}H_{20} + H + H = C_2H_5 + C_8H_{17}$ | 0.172E+11 | -0.437E+04 |
| 169 | $C_{10}H_{20} + H + H = C_3H_7 + C_7H_{15}$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 170 | $C_{10}H_{20} + H + H = C_4H_9 + C_6H_{13}$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 171 | $C_{10}H_{20} + H + H = C_5H_{11} + C_5H_{11}$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 172 | $C_{10}H_{20} + H + H = C_6H_{13} + C_4H_9$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 173 | $C_{10}H_{20} + H + H = C_7H_{15} + C_3H_7$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 174 | $C_{10}H_{20} + H + H = C_8H_{17} + C_2H_5$ | 0.172E+11 | -0.437E+04 |
| n-Нонан | | | |
| 1 | $C_9H_{20} + O_2 = C_9H_{19} + HO_2$ | 0.400E+10 | 0.239E+05 |
| 2 | $C_9H_{20} + OH = C_9H_{19} + H_2O$ | 0.630E+10 | 0.600E+03 |
| 3 | $C_9H_{20} + H = C_9H_{19} + H_2$ | 0.930E+11 | 0.403E+04 |
| 4 | $C_9H_{20} + O = C_9H_{19} + OH$ | 0.506E+12 | 0.483E+04 |
| 5 | $C_9H_{20} + HO_2 = C_9H_{19} + H_2O_2$ | 0.600E+09 | 0.856E+04 |
| 6 | $C_9H_{18} + H = C_9H_{19}$ | 0.189E+10 | 0.315E+03 |
| 7 | $C_9H_{19} + O_2 = C_9H_{18} + HO_2$ | 0.300E+11 | 0.700E+04 |
| 8 | $C_9H_{19} + OH = C_9H_{18} + H_2O$ | 0.600E+10 | 0.000E+00 |
| 9 | $C_9H_{20} = H + C_9H_{19}$ | 0.359E+14 | 0.376E+05 |
| 10 | $C_9H_{20} = CH_3 + C_8H_{17}$ | 0.404E+16 | 0.421E+05 |
| 11 | $C_9H_{20} = C_2H_5 + C_7H_{15}$ | 0.195E+17 | 0.428E+05 |
| 12 | $C_9H_{20} = C_3H_7 + C_6H_{13}$ | 0.157E+17 | 0.428E+05 |
| 13 | $C_9H_{20} = C_4H_9 + C_5H_{11}$ | 0.157E+17 | 0.428E+05 |
| 14 | $C_9H_{19} + H = C_9H_{18} + H_2$ | 0.600E+10 | 0.000E+00 |
| 15 | $C_9H_{19} + CH_3 = C_9H_{18} + CH_4$ | 0.351E+09 | -0.106E+03 |
| 16 | $C_9H_{19} + C_2H_5 = C_9H_{18} + C_2H_6$ | 0.158E+11 | 0.466E+03 |
| 17 | $C_9H_{19} + C_3H_7 = C_9H_{18} + C_3H_8$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 18 | $C_9H_{19} + C_4H_9 = C_9H_{18} + C_4H_{10}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 19 | $C_9H_{19} + C_5H_{11} = C_9H_{18} + C_5H_{12}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 20 | $C_9H_{19} + C_6H_{13} = C_9H_{18} + C_6H_{14}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 21 | $C_9H_{19} + C_7H_{15} = C_9H_{18} + C_7H_{16}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 22 | $C_9H_{19} + C_8H_{17} = C_9H_{18} + C_8H_{18}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 23 | $C_9H_{19} + O = C_9H_{18} + OH$ | 0.200E+12 | 0.000E+00 |
| 24 | $C_9H_{19} + O_2 = C_9H_{19}O_2$ | 0.398E+08 | -0.500E+03 |
| 25 | $C_9H_{20} + CH_3O_2 = C_9H_{19} + CH_3O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 26 | $C_9H_{20} + C_2H_5O_2 = C_9H_{19} + C_2H_5O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 27 | $C_9H_{20} + C_3H_7O_2 = C_9H_{19} + C_3H_7O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 28 | $C_9H_{20} + C_4H_9O_2 = C_9H_{19} + C_4H_9O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 29 | $C_9H_{20} + C_5H_{11}O_2 = C_9H_{19} + C_5H_{11}O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 30 | $C_9H_{20} + C_6H_{13}O_2 = C_9H_{19} + C_6H_{13}O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 31 | $C_9H_{20} + C_7H_{15}O_2 = C_9H_{19} + C_7H_{15}O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 32 | $C_9H_{20} + C_8H_{17}O_2 = C_9H_{19} + C_8H_{17}O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |
| 33 | $C_9H_{20} + C_9H_{19}O_2 = C_9H_{19} + C_9H_{19}O_2H$ | 0.207E+11 | 0.650E+04 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|--------|---|---------------|------------|
| 34 | $C_9H_{20}O_2 = C_9H_{19}O + OH$ | 0.500E+16 | 0.200E+05 |
| 35 | $C_9H_{19}O = H_2CO + C_8H_{17}$ | 0.159E+15 | 0.797E+04 |
| 36 | $C_9H_{19}O = CH_3CHO + C_7H_{15}$ | 0.314E+15 | 0.113E+05 |
| 37 | $C_9H_{19}O = C_2H_5CHO + C_6H_{13}$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 38 | $C_9H_{19}O = C_4H_8O + C_5H_{11}$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 39 | $C_9H_{19}O = C_5H_{10}O + C_4H_9$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 40 | $C_9H_{19}O = C_6H_{12}O + C_3H_7$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 41 | $C_9H_{19}O = C_7H_{14}O + C_2H_5$ | 0.374E+15 | 0.103E+05 |
| 42 | $C_9H_{19}O = C_8H_{16}O + CH_3$ | 0.775E+14 | 0.108E+05 |
| 43 | $C_9H_{19}O = C_9H_{18}O + H$ | 0.688E+12 | 0.626E+04 |
| 44 | $C_9H_{19}O_2 + H = C_9H_{19}O + OH$ | 0.236E+11 | -0.161E+04 |
| 45 | $C_9H_{19}O_2 + CH_3 = C_9H_{19}O + CH_3O$ | 0.364E+09 | -0.166E+03 |
| 46 | $C_9H_{19}O_2 + C_2H_5 = C_9H_{19}O + C_2H_5O$ | 0.827E+09 | -0.649E+03 |
| 47 | $C_9H_{19}O_2 + C_3H_7 = C_9H_{19}O + C_3H_7O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 48 | $C_9H_{19}O_2 + C_4H_9 = C_9H_{19}O + C_4H_9O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 49 | $C_9H_{19}O_2 + C_5H_{11} = C_9H_{19}O + C_5H_{11}O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 50 | $C_9H_{19}O_2 + C_6H_{13} = C_9H_{19}O + C_6H_{13}O$ | 0.629E+09 | 0.000E+00 |
| 51 | $C_9H_{19}O_2 + C_7H_{15} = C_9H_{19}O + C_7H_{15}O$ | 0.627E+09 | 0.000E+00 |
| 52 | $C_9H_{19}O_2 + C_8H_{17} = C_9H_{19}O + C_8H_{17}O$ | 0.627E+09 | 0.000E+00 |
| 53 | $C_9H_{19}O_2 + C_9H_{19} = C_9H_{19}O + C_9H_{19}O$ | 0.365E+09 | 0.156E+04 |
| 54 | $C_9H_{19}O_2 + H_2CO = C_9H_{20}O_2 + HCO$ | 0.320E+09 | 0.564E+04 |
| 55 | $C_9H_{19}O_2 + CH_3CHO = C_9H_{20}O_2 + CH_3CO$ | 0.315E+09 | 0.560E+04 |
| 56 | $C_9H_{19}O_2 + C_2H_5CHO = C_9H_{20}O_2 + C_2H_5CO$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 57 | $C_9H_{19}O_2 + C_4H_8O = C_9H_{20}O_2 + C_4H_7O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 58 | $C_9H_{19}O_2 + C_5H_{10}O = C_9H_{20}O_2 + C_5H_9O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 59 | $C_9H_{19}O_2 + C_6H_{12}O = C_9H_{20}O_2 + C_6H_{11}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 60 | $C_9H_{19}O_2 + C_7H_{14}O = C_9H_{20}O_2 + C_7H_{13}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 61 | $C_9H_{19}O_2 + C_8H_{16}O = C_9H_{20}O_2 + C_8H_{15}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 62 | $C_9H_{19}O_2 + C_9H_{18}O = C_9H_{20}O_2 + C_9H_{17}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 63 | $C_9H_{19} + HO_2 = C_9H_{19}O + OH$ | 0.298E+11 | 0.000E+00 |
| 64 | $C_9H_{19} + O_2 = C_9H_{18}O + OH$ | 0.398E+10 | 0.900E+04 |
| 65 | $C_9H_{19} + C_2H_5 = C_9H_{20} + C_2H_4$ | 0.625E+09 | 0.335E+03 |
| 66 | $C_9H_{19} + C_3H_7 = C_9H_{20} + C_3H_6$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 67 | $C_9H_{19} + C_4H_9 = C_9H_{20} + C_4H_8$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 68 | $C_9H_{19} + C_5H_{11} = C_9H_{20} + C_5H_{10}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 69 | $C_9H_{19} + C_6H_{13} = C_9H_{20} + C_6H_{12}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 70 | $C_9H_{19} + C_7H_{15} = C_9H_{20} + C_7H_{14}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 71 | $C_9H_{19} + C_8H_{17} = C_9H_{20} + C_8H_{16}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 72 | $C_9H_{19} + C_9H_{19} = C_9H_{20} + C_9H_{18}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 73 | $C_9H_{19} + O_2 = H_2CO + C_8H_{17}O$ | 0.368E+09 | 0.565E+04 |
| 74 | $C_9H_{19} + O_2 = CH_3CHO + C_7H_{15}O$ | 0.725E+09 | 0.454E+04 |
| 75 | $C_9H_{19} + O_2 = C_2H_5CHO + C_6H_{13}O$ | 0.703E+09 | 0.446E+04 |
| 76 | $C_9H_{19} + O_2 = C_4H_8O + C_5H_{11}O$ | 0.704E+09 | 0.446E+04 |
| 77 | $C_9H_{19} + O_2 = C_5H_{10}O + C_4H_9O$ | 0.704E+09 | 0.446E+04 |
| 78 | $C_9H_{19} + O_2 = C_6H_{12}O + C_3H_7O$ | 0.703E+09 | 0.446E+04 |
| 79 | $C_9H_{19} + O_2 = C_7H_{14}O + C_2H_5O$ | 0.114E+10 | 0.382E+04 |
| 80 | $C_9H_{19} + O_2 = C_8H_{16}O + CH_3O$ | 0.104E+09 | 0.453E+04 |
| 81 | $C_9H_{19} + OH = CH_3 + C_8H_{17}O$ | 0.184E+11 | -0.194E+04 |
| 82 | $C_9H_{19} + OH = C_2H_5 + C_7H_{15}O$ | 0.888E+11 | 0.417E+03 |
| 83 | $C_9H_{19} + OH = C_3H_7 + C_6H_{13}O$ | 0.719E+11 | 0.413E+03 |
| 84 | $C_9H_{19} + OH = C_4H_9 + C_5H_{11}O$ | 0.719E+11 | 0.413E+03 |
| 85 | $C_9H_{19} + OH = C_5H_{11} + C_4H_9O$ | 0.719E+11 | 0.413E+03 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|--------|---|---------------|------------|
| 86 | $C_9H_{19} + OH = C_6H_{13} + C_3H_7O$ | 0.719E+11 | 0.413E+03 |
| 87 | $C_9H_{19} + OH = C_7H_{15} + C_2H_5O$ | 0.117E+12 | -0.232E+03 |
| 88 | $C_9H_{19} + OH = C_8H_{17} + CH_3O$ | 0.107E+11 | 0.480E+03 |
| 89 | $C_9H_{19} + H = CH_3 + C_8H_{17}$ | 0.388E+11 | 0.546E+03 |
| 90 | $C_9H_{19} + H = C_2H_5 + C_7H_{15}$ | 0.187E+12 | 0.318E+03 |
| 91 | $C_9H_{19} + H = C_3H_7 + C_6H_{13}$ | 0.151E+12 | 0.314E+03 |
| 92 | $C_9H_{19} + H = C_4H_9 + C_5H_{11}$ | 0.151E+12 | 0.314E+03 |
| 93 | $C_9H_{19} + H = CH_2 + C_8H_{18}$ | 0.423E+08 | 0.302E+04 |
| 94 | $C_9H_{19} + H = C_2H_4 + C_7H_{16}$ | 0.723E+07 | -0.641E+04 |
| 95 | $C_9H_{19} + H = C_3H_6 + C_6H_{14}$ | 0.177E+08 | -0.675E+04 |
| 96 | $C_9H_{19} + H = C_4H_8 + C_5H_{12}$ | 0.177E+08 | -0.675E+04 |
| 97 | $C_9H_{19} + H = C_5H_{10} + C_4H_{10}$ | 0.177E+08 | -0.675E+04 |
| 98 | $C_9H_{19} + H = C_6H_{12} + C_3H_8$ | 0.177E+08 | -0.675E+04 |
| 99 | $C_9H_{19} + H = C_7H_{14} + C_2H_6$ | 0.252E+10 | -0.677E+04 |
| 100 | $C_9H_{19} + H = C_8H_{16} + CH_4$ | 0.116E+08 | -0.711E+04 |
| 101 | $C_9H_{19} + O = H + C_9H_{18}O$ | 0.699E+09 | 0.565E+03 |
| 102 | $C_9H_{19} + O = CH_3 + C_8H_{16}O$ | 0.787E+11 | -0.952E+03 |
| 103 | $C_9H_{19} + O = C_2H_5 + C_7H_{14}O$ | 0.380E+12 | -0.118E+04 |
| 104 | $C_9H_{19} + O = C_3H_7 + C_6H_{12}O$ | 0.308E+12 | -0.118E+04 |
| 105 | $C_9H_{19} + O = C_4H_9 + C_5H_{10}O$ | 0.308E+12 | -0.118E+04 |
| 106 | $C_9H_{19} + O = C_5H_{11} + C_4H_8O$ | 0.308E+12 | -0.118E+04 |
| 107 | $C_9H_{19} + O = C_6H_{13} + C_2H_5CHO$ | 0.308E+12 | -0.118E+04 |
| 108 | $C_9H_{19} + O = C_7H_{15} + CH_3CHO$ | 0.319E+12 | -0.111E+04 |
| 109 | $C_9H_{19} + O = C_8H_{17} + H_2CO$ | 0.162E+12 | -0.352E+01 |
| 110 | $C_9H_{17}O + HO_2 = C_9H_{18}O + O_2$ | 0.530E+08 | 0.000E+00 |
| 111 | $C_9H_{18}O + OH = C_9H_{17}O + H_2O$ | 0.100E+11 | 0.000E+00 |
| 112 | $C_9H_{18}O + H = C_9H_{17}O + H_2$ | 0.140E+11 | 0.165E+04 |
| 113 | $C_9H_{18}O + O = C_9H_{17}O + OH$ | 0.568E+10 | 0.780E+03 |
| 114 | $C_9H_{18}O + HO_2 = C_9H_{17}O + H_2O_2$ | 0.600E+09 | 0.500E+04 |
| 115 | $C_8H_{17} + HCO = C_9H_{18}O$ | 0.222E+11 | 0.352E+01 |
| 116 | $C_8H_{17} + CO = C_9H_{17}O$ | 0.186E+09 | 0.242E+04 |
| 117 | $C_9H_{17}O + H = C_8H_{17} + HCO$ | 0.487E+10 | 0.240E+04 |
| 118 | $C_9H_{17}O + O = C_8H_{17}O + CO$ | 0.369E+10 | 0.646E+03 |
| 119 | $C_9H_{18} + OH = C_9H_{17} + H_2O$ | 0.900E+11 | 0.325E+04 |
| 120 | $C_9H_{17} + H_2 = C_9H_{18} + H$ | 0.853E+11 | 0.533E+04 |
| 121 | $C_9H_{17} + O_2 = C_7H_{15}O_2 + C_2H$ | 0.241E+11 | 0.396E+04 |
| 122 | $C_9H_{18} + HCO = C_9H_{17} + H_2CO$ | 0.600E+11 | 0.900E+04 |
| 123 | $C_9H_{18} + CH_3 = C_9H_{17} + CH_4$ | 0.107E+09 | 0.268E+04 |
| 124 | $C_9H_{18} + C_2H_5 = C_9H_{17} + C_2H_6$ | 0.481E+10 | 0.325E+04 |
| 125 | $C_9H_{18} + C_3H_7 = C_9H_{17} + C_3H_8$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 126 | $C_9H_{18} + C_4H_9 = C_9H_{17} + C_4H_{10}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 127 | $C_9H_{18} + C_5H_{11} = C_9H_{17} + C_5H_{12}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 128 | $C_9H_{18} + C_6H_{13} = C_9H_{17} + C_6H_{14}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 129 | $C_9H_{18} + C_7H_{15} = C_9H_{17} + C_7H_{16}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 130 | $C_9H_{18} + C_8H_{17} = C_9H_{17} + C_8H_{18}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 131 | $C_7H_{15} + C_2H_2 = C_9H_{17}$ | 0.141E+10 | 0.143E+04 |
| 132 | $C_9H_{18} = C_2H_3 + C_7H_{15}$ | 0.390E+14 | 0.379E+05 |
| 133 | $C_9H_{18} = C_3H_5 + C_6H_{13}$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 134 | $C_9H_{18} = C_4H_7 + C_5H_{11}$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 135 | $C_9H_{18} = C_5H_9 + C_4H_9$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 136 | $C_9H_{18} = C_6H_{11} + C_3H_7$ | 0.113E+14 | 0.446E+05 |
| 137 | $C_9H_{18} = C_7H_{13} + C_2H_5$ | 0.140E+14 | 0.446E+05 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|----------------|--|---------------|------------|
| 138 | $C_9H_{18} = C_8H_{15} + CH_3$ | 0.289E+13 | 0.439E+05 |
| 139 | $C_9H_{18} + O_2 = C_9H_{17} + HO_2$ | 0.600E+11 | 0.236E+05 |
| 140 | $C_9H_{18} + O = C_8H_{17} + HCO$ | 0.404E+10 | 0.226E+03 |
| 141 | $C_9H_{17} + OH = C_8H_{17} + HCO$ | 0.485E+10 | -0.352E+01 |
| 142 | $C_9H_{17} + H = C_7H_{16} + C_2H_2$ | 0.918E+10 | 0.362E+03 |
| 143 | $C_9H_{17} + O = C_8H_{17} + CO$ | 0.485E+10 | -0.352E+01 |
| 144 | $C_9H_{17} + O = C_7H_{15}O + C_2H_2$ | 0.403E+11 | -0.662E+02 |
| 145 | $CH_3 + C_8H_{17} = C_9H_{18} + H_2$ | 0.248E+14 | 0.191E+05 |
| 146 | $C_2H_5 + C_7H_{15} = C_9H_{18} + H_2$ | 0.512E+13 | 0.193E+05 |
| 147 | $C_3H_7 + C_6H_{13} = C_9H_{18} + H_2$ | 0.636E+13 | 0.193E+05 |
| 148 | $C_4H_9 + C_5H_{11} = C_9H_{18} + H_2$ | 0.636E+13 | 0.193E+05 |
| 149 | $C_5H_{11} + C_4H_9 = C_9H_{18} + H_2$ | 0.636E+13 | 0.193E+05 |
| 150 | $C_6H_{13} + C_3H_7 = C_9H_{18} + H_2$ | 0.636E+13 | 0.193E+05 |
| 151 | $C_7H_{15} + C_2H_5 = C_9H_{18} + H_2$ | 0.512E+13 | 0.193E+05 |
| 152 | $C_9H_{18} + H + H = CH_3 + C_8H_{17}$ | 0.356E+10 | -0.414E+04 |
| 153 | $C_9H_{18} + H + H = C_2H_5 + C_7H_{15}$ | 0.172E+11 | -0.437E+04 |
| 154 | $C_9H_{18} + H + H = C_3H_7 + C_6H_{13}$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 155 | $C_9H_{18} + H + H = C_4H_9 + C_5H_{11}$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 156 | $C_9H_{18} + H + H = C_5H_{11} + C_4H_9$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 157 | $C_9H_{18} + H + H = C_6H_{13} + C_3H_7$ | 0.139E+11 | -0.438E+04 |
| 158 | $C_9H_{18} + H + H = C_7H_{15} + C_2H_5$ | 0.172E+11 | -0.437E+04 |
| н-Октан | | | |
| 1 | $C_8H_{18} + O_2 = C_8H_{17} + HO_2$ | 0.400E+10 | 0.239E+05 |
| 2 | $C_8H_{18} + OH = C_8H_{17} + H_2O$ | 0.630E+10 | 0.600E+03 |
| 3 | $C_8H + H = C_8H_{17} + H_2$ | 0.930E+11 | 0.403E+04 |
| 4 | $C_8H_{18} + O = C_8H_{17} + OH$ | 0.371E+04 | 0.277E+04 |
| 5 | $C_8H_{18} + HO_2 = C_8H_{17} + H_2O_2$ | 0.600E+09 | 0.856E+04 |
| 6 | $C_8H_{16} + H = C_8H_{17}$ | 0.189E+10 | 0.315E+03 |
| 7 | $C_8H_{17} + O_2 = C_8H_{16} + HO_2$ | 0.300E+11 | 0.700E+04 |
| 8 | $C_8H_{17} + OH = C_8H_{16} + H_2O$ | 0.600E+10 | 0.000E+00 |
| 9 | $C_8H_{18} = H + C_8H_{17}$ | 0.359E+14 | 0.376E+05 |
| 10 | $C_8H_{18} = CH_3 + C_7H_{15}$ | 0.404E+16 | 0.421E+05 |
| 11 | $C_8H_{18} = C_2H_5 + C_6H_{13}$ | 0.194E+17 | 0.428E+05 |
| 12 | $C_8H_{18} = C_3H_7 + C_5H_{11}$ | 0.157E+17 | 0.428E+05 |
| 13 | $C_8H_{18} = C_4H_9 + C_4H_9$ | 0.157E+17 | 0.428E+05 |
| 14 | $C_8H_{17} + H = C_8H_{16} + H_2$ | 0.600E+10 | 0.000E+00 |
| 15 | $C_8H_{17} + CH_3 = C_8H_{16} + CH_4$ | 0.351E+09 | -0.106E+03 |
| 16 | $C_8H_{17} + C_2H_5 = C_8H_{16} + C_2H_6$ | 0.158E+11 | 0.466E+03 |
| 17 | $C_8H_{17} + C_3H_7 = C_8H_{16} + C_3H_8$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 18 | $C_8H_{17} + C_4H_9 = C_8H_{16} + C_4H_{10}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 19 | $C_8H_{17} + C_5H_{11} = C_8H_{16} + C_5H_{12}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 20 | $C_8H_{17} + C_6H_{13} = C_8H_{16} + C_6H_{14}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 21 | $C_8H_{17} + C_7H_{15} = C_8H_{16} + C_7H_{16}$ | 0.138E+09 | 0.488E+03 |
| 22 | $C_8H_{17} + O = C_8H_{16} + OH$ | 0.200E+12 | 0.000E+00 |
| 23 | $C_8H_{17} + O_2 = C_8H_{17}O_2$ | 0.398E+08 | -0.500E+03 |
| 24 | $C_8H_{18} + CH_3O_2 = C_8H_{17} + CH_3O_2H$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |
| 25 | $C_8H_{18} + C_2H_5O_2 = C_8H_{17} + C_2H_5O_2H$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |
| 26 | $C_8H_{18} + C_3H_7O_2 = C_8H_{17} + C_3H_7O_2H$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |
| 27 | $C_8H_{18} + C_4H_9O_2 = C_8H_{17} + C_4H_9O_2H$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |
| 28 | $C_8H_{18} + C_5H_{11}O_2 = C_8H_{17} + C_5H_{11}O_2H$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |
| 29 | $C_8H_{18} + C_6H_{13}O_2 = C_8H_{17} + C_6H_{13}O_2H$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |
| 30 | $C_8H_{18} + C_7H_{15}O_2 = C_8H_{17} + C_7H_{15}O_2H$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|--------|---|---------------|------------|
| 31 | $C_8H_{18} + C_8H_{17}O_2 = C_8H_{17} + C_8H_{18}O_2$ | 0.169E+11 | 0.630E+04 |
| 32 | $C_8H_{18}O_2 = C_8H_{17}O + OH$ | 0.500E+16 | 0.200E+05 |
| 33 | $C_8H_{17}O = H_2CO + C_7H_{15}$ | 0.159E+15 | 0.797E+04 |
| 34 | $C_8H_{17}O = CH_3CHO + C_6H_{13}$ | 0.313E+15 | 0.113E+05 |
| 35 | $C_8H_{17}O = C_2H_5CHO + C_5H_{11}$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 36 | $C_8H_{17}O = C_4H_8O + C_4H_9$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 37 | $C_8H_{17}O = C_5H_{10}O + C_3H_7$ | 0.303E+15 | 0.103E+05 |
| 38 | $C_8H_{17}O = C_6H_{12}O + C_2H_5$ | 0.374E+15 | 0.103E+05 |
| 39 | $C_8H_{17}O = C_7H_{14}O + CH_3$ | 0.775E+14 | 0.108E+05 |
| 40 | $C_8H_{17}O = C_8H_{16}O + H$ | 0.688E+12 | 0.626E+04 |
| 41 | $C_8H_{17}O_2 + H = C_8H_{17}O + OH$ | 0.236E+11 | -0.161E+04 |
| 42 | $C_8H_{17}O_2 + CH_3 = C_8H_{17}O + CH_3O$ | 0.364E+09 | -0.166E+03 |
| 43 | $C_8H_{17}O_2 + C_2H_5 = C_8H_{17}O + C_2H_5O$ | 0.827E+09 | -0.649E+03 |
| 44 | $C_8H_{17}O_2 + C_3H_7 = C_8H_{17}O + C_3H_7O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 45 | $C_8H_{17}O_2 + C_4H_9 = C_8H_{17}O + C_4H_9O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 46 | $C_8H_{17}O_2 + C_5H_{11} = C_8H_{17}O + C_5H_{11}O$ | 0.630E+09 | 0.000E+00 |
| 47 | $C_8H_{17}O_2 + C_6H_{13} = C_8H_{17}O + C_6H_{13}O$ | 0.629E+09 | 0.000E+00 |
| 48 | $C_8H_{17}O_2 + C_7H_{15} = C_8H_{17}O + C_7H_{15}O$ | 0.627E+09 | 0.000E+00 |
| 49 | $C_8H_{17}O_2 + C_8H_{17} = C_8H_{17}O + C_8H_{17}O$ | 0.627E+09 | 0.000E+00 |
| 50 | $C_8H_{17}O_2 + H_2CO = C_8H_{18}O_2 + HCO$ | 0.320E+09 | 0.564E+04 |
| 51 | $C_8H_{17}O_2 + CH_3CHO = C_8H_{18}O_2 + CH_3CO$ | 0.315E+09 | 0.560E+04 |
| 52 | $C_8H_{17}O_2 + C_2H_5CHO = C_8H_{18}O_2 + C_2H_5CO$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 53 | $C_8H_{17}O_2 + C_4H_8O = C_8H_{18}O_2 + C_4H_7O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 54 | $C_8H_{17}O_2 + C_5H_{10}O = C_8H_{18}O_2 + C_5H_9O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 55 | $C_8H_{17}O_2 + C_6H_{12}O = C_8H_{18}O_2 + C_6H_{11}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 56 | $C_8H_{17}O_2 + C_7H_{14}O = C_8H_{18}O_2 + C_7H_{13}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 57 | $C_8H_{17}O_2 + C_8H_{16}O = C_8H_{18}O_2 + C_8H_{15}O$ | 0.315E+09 | 0.554E+04 |
| 58 | $C_8H_{17} + HO_2 = C_8H_{17}O + OH$ | 0.298E+11 | 0.000E+00 |
| 59 | $C_8H_{17} + O_2 = C_8H_{16}O + OH$ | 0.398E+10 | 0.900E+04 |
| 60 | $C_8H_{17} + C_2H_5 = C_8H_{18} + C_2H_4$ | 0.625E+09 | 0.335E+03 |
| 61 | $C_8H_{17} + C_3H_7 = C_8H_{18} + C_3H_6$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 62 | $C_8H_{17} + C_4H_9 = C_8H_{18} + C_4H_8$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 63 | $C_8H_{17} + C_5H_{11} = C_8H_{18} + C_5H_{10}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 64 | $C_8H_{17} + C_6H_{13} = C_8H_{18} + C_6H_{12}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 65 | $C_8H_{17} + C_7H_{15} = C_8H_{18} + C_7H_{14}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 66 | $C_8H_{17} + C_8H_{17} = C_8H_{18} + C_8H_{16}$ | 0.190E+10 | 0.000E+00 |
| 67 | $C_8H_{17} + O_2 = H_2CO + C_7H_{15}O$ | 0.368E+09 | 0.565E+04 |
| 68 | $C_8H_{17} + O_2 = CH_3CHO + C_6H_{13}O$ | 0.725E+09 | 0.454E+04 |
| 69 | $C_8H_{17} + O_2 = C_2H_5CHO + C_5H_{11}O$ | 0.703E+09 | 0.446E+04 |
| 70 | $C_8H_{17} + O_2 = C_4H_8O + C_4H_9O$ | 0.703E+09 | 0.446E+04 |
| 71 | $C_8H_{17} + O_2 = C_5H_{10}O + C_3H_7O$ | 0.703E+09 | 0.446E+04 |
| 72 | $C_8H_{17} + O_2 = C_6H_{12}O + C_2H_5O$ | 0.114E+10 | 0.382E+04 |
| 73 | $C_8H_{17} + O_2 = C_7H_{14}O + CH_3O$ | 0.104E+09 | 0.453E+04 |
| 74 | $C_8H_{17} + OH = CH_3 + C_7H_{15}O$ | 0.184E+11 | -0.194E+04 |
| 75 | $C_8H_{17} + OH = C_2H_5 + C_6H_{13}O$ | 0.888E+11 | 0.417E+03 |
| 76 | $C_8H_{17} + OH = C_3H_7 + C_5H_{11}O$ | 0.718E+11 | 0.413E+03 |
| 77 | $C_8H_{17} + OH = C_4H_9 + C_4H_9O$ | 0.718E+11 | 0.413E+03 |
| 78 | $C_8H_{17} + OH = C_5H_{11} + C_3H_7O$ | 0.718E+11 | 0.413E+03 |
| 79 | $C_8H_{17} + OH = C_6H_{13} + C_2H_5O$ | 0.117E+12 | -0.232E+03 |
| 80 | $C_8H_{17} + OH = C_7H_{15} + CH_3O$ | 0.107E+11 | 0.480E+03 |
| 81 | $C_8H_{17} + H = CH_3 + C_7H_{15}$ | 0.388E+11 | 0.546E+03 |
| 82 | $C_8H_{17} + H = C_2H_5 + C_6H_{13}$ | 0.187E+12 | 0.318E+03 |

Таблица 2. Продолжение

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|--------|---|---------------|------------|
| 83 | $C_8H_{17} + H = C_3H_7 + C_5H_{11}$ | 0.151E+12 | 0.314E+03 |
| 84 | $C_8H_{17} + H = C_4H_9 + C_4H_9$ | 0.151E+12 | 0.314E+03 |
| 85 | $C_8H_{17} + H = CH_2 + C_7H_{16}$ | 0.423E+08 | 0.302E+04 |
| 86 | $C_8H_{17} + H = C_2H_4 + C_6H_{14}$ | 0.721E+07 | -0.641E+04 |
| 87 | $C_8H_{17} + H = C_3H_6 + C_5H_{12}$ | 0.177E+08 | -0.675E+04 |
| 88 | $C_8H_{17} + H = C_4H_8 + C_4H_{10}$ | 0.177E+08 | -0.675E+04 |
| 89 | $C_8H_{17} + H = C_5H_{10} + C_3H_8$ | 0.177E+08 | -0.675E+04 |
| 90 | $C_8H_{17} + H = C_6H_{12} + C_2H_6$ | 0.251E+10 | -0.677E+04 |
| 91 | $C_8H_{17} + H = C_7H_{14} + CH_4$ | 0.116E+08 | -0.711E+04 |
| 92 | $C_8H_{17} + O = H + C_8H_{16}O$ | 0.699E+09 | 0.565E+03 |
| 93 | $C_8H_{17} + O = CH_3 + C_7H_{14}O$ | 0.787E+11 | -0.952E+03 |
| 94 | $C_8H_{17} + O = C_2H_5 + C_6H_{12}O$ | 0.380E+12 | -0.118E+04 |
| 95 | $C_8H_{17} + O = C_3H_7 + C_5H_{10}O$ | 0.307E+12 | -0.118E+04 |
| 96 | $C_8H_{17} + O = C_4H_9 + C_4H_8O$ | 0.307E+12 | -0.118E+04 |
| 97 | $C_8H_{17} + O = C_5H_{11} + C_2H_5CHO$ | 0.307E+12 | -0.118E+04 |
| 98 | $C_8H_{17} + O = C_6H_{13} + CH_3CHO$ | 0.317E+12 | -0.111E+04 |
| 99 | $C_8H_{17} + O = C_7H_{15} + H_2CO$ | 0.162E+12 | -0.352E+01 |
| 100 | $C_8H_{15}O + HO_2 = C_8H_{16}O + O_2$ | 0.530E+08 | 0.000E+00 |
| 101 | $C_8H_{16}O + OH = C_8H_{15}O + H_2O$ | 0.100E+11 | 0.000E+00 |
| 102 | $C_8H_{16}O + H = C_8H_{15}O + H_2$ | 0.140E+11 | 0.165E+04 |
| 103 | $C_8H_{16}O + O = C_8H_{15}O + OH$ | 0.568E+10 | 0.780E+03 |
| 104 | $C_8H_{16}O + HO_2 = C_8H_{15}O + H_2O_2$ | 0.600E+09 | 0.500E+04 |
| 105 | $C_7H_{15} + HCO = C_8H_{16}O$ | 0.222E+11 | 0.352E+01 |
| 106 | $C_7H_{15} + CO = C_8H_{15}O$ | 0.186E+09 | 0.242E+04 |
| 107 | $C_8H_{15}O + H = C_7H_{15} + HCO$ | 0.487E+10 | 0.240E+04 |
| 108 | $C_8H_{15}O + O = C_7H_{15}O + CO$ | 0.369E+10 | 0.646E+03 |
| 109 | $C_8H_{16} + OH = C_8H_{15} + H_2O$ | 0.900E+11 | 0.325E+04 |
| 110 | $C_8H_{15} + H_2 = C_8H_{16} + H$ | 0.853E+11 | 0.533E+04 |
| 111 | $C_8H_{15} + O_2 = C_6H_{13}O_2 + C_2H_2$ | 0.241E+11 | 0.396E+04 |
| 112 | $C_8H_{16} + HCO = C_8H_{15} + H_2CO$ | 0.600E+11 | 0.900E+04 |
| 113 | $C_8H_{16} + CH_3 = C_8H_{15} + CH_4$ | 0.107E+09 | 0.268E+04 |
| 114 | $C_8H_{16} + C_2H_5 = C_8H_{15} + C_2H_6$ | 0.481E+10 | 0.325E+04 |
| 115 | $C_8H_{16} + C_3H_7 = C_8H_{15} + C_3H_8$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 14 | $C_8H_{17} + H = C_8H_{16} + H_2$ | 0.600E+10 | 0.000E+00 |
| 116 | $C_8H_{16} + C_4H_9 = C_8H_{15} + C_4H_{10}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 117 | $C_8H_{16} + C_5H_{11} = C_8H_{15} + C_5H_{12}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 118 | $C_8H_{16} + C_6H_{13} = C_8H_{15} + C_6H_{14}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 119 | $C_8H_{16} + C_7H_{15} = C_8H_{15} + C_7H_{16}$ | 0.420E+08 | 0.328E+04 |
| 120 | $C_6H_{13} + C_2H_2 = C_8H_{15}$ | 0.141E+10 | 0.143E+04 |
| 121 | $C_8H_{16} = C_2H_3 + C_6H_{13}$ | 0.389E+14 | 0.379E+05 |
| 122 | $C_8H_{16} = C_3H_5 + C_5H_{11}$ | 0.112E+14 | 0.446E+05 |
| 123 | $C_8H_{16} = C_4H_7 + C_4H_9$ | 0.112E+14 | 0.446E+05 |
| 124 | $C_8H_{16} = C_5H_9 + C_3H_7$ | 0.112E+14 | 0.446E+05 |
| 125 | $C_8H_{16} = C_6H_{11} + C_2H_5$ | 0.139E+14 | 0.446E+05 |
| 126 | $C_8H_{16} = C_7H_{13} + CH_3$ | 0.289E+13 | 0.439E+05 |
| 127 | $C_8H_{16} + O_2 = C_8H_{15} + HO_2$ | 0.600E+11 | 0.236E+05 |
| 128 | $C_8H_{16} + O = C_7H_{15} + HCO$ | 0.404E+10 | 0.226E+03 |
| 129 | $C_8H_{15} + OH = C_7H_{15} + HCO$ | 0.485E+10 | -0.352E+01 |
| 130 | $C_8H_{15} + H = C_6H_{14} + C_2H_2$ | 0.915E+10 | 0.362E+03 |
| 131 | $C_8H_{15} + O = C_7H_{15} + CO$ | 0.485E+10 | -0.352E+01 |
| 132 | $C_8H_{15} + O = C_6H_{13}O + C_2H_2$ | 0.403E+11 | -0.662E+02 |
| 133 | $CH_3 + C_7H_{15} = C_8H_{16} + H_2$ | 0.248E+14 | 0.191E+05 |

Таблица 2. Окончание

| № п.п. | Реакция | A, л, моль, с | E/R, К |
|--------|--|---------------|------------|
| 134 | $C_2H_5 + C_6H_{13} = C_8H_{16} + H_2$ | 0.514E+13 | 0.193E+05 |
| 135 | $C_3H_7 + C_5H_{11} = C_8H_{16} + H_2$ | 0.637E+13 | 0.193E+05 |
| 136 | $C_4H_9 + C_4H_9 = C_8H_{16} + H_2$ | 0.637E+13 | 0.193E+05 |
| 137 | $C_5H_{11} + C_3H_7 = C_8H_{16} + H_2$ | 0.637E+13 | 0.193E+05 |
| 138 | $C_6H_{13} + C_2H_5 = C_8H_{16} + H_2$ | 0.514E+13 | 0.193E+05 |
| 139 | $C_8H_{16} + H + H = CH_3 + C_7H_{15}$ | 0.145E+07 | -0.500E+04 |
| 140 | $C_8H_{16} + H + H = C_2H_5 + C_6H_{13}$ | 0.700E+07 | -0.523E+04 |
| 141 | $C_8H_{16} + H + H = C_3H_7 + C_5H_{11}$ | 0.565E+07 | -0.524E+04 |
| 142 | $C_8H_{16} + H + H = C_4H_9 + C_4H_9$ | 0.565E+07 | -0.524E+04 |
| 143 | $C_8H_{16} + H + H = C_5H_{11} + C_3H_7$ | 0.565E+07 | -0.524E+04 |
| 144 | $C_8H_{16} + H + H = C_6H_{13} + C_2H_5$ | 0.700E+07 | -0.523E+04 |

Далее следует механизм окисления и горения C_1-C_7

пературных неоднородностей и многоочаговости, в то время как в действительности оно реализуется. Многостадийность приводит к явлению отрицательного температурного коэффициента (ОТК) скорости реакции, когда при более высокой начальной температуре суммарные задержки самовоспламенения оказываются больше, чем при низкой температуре. Этот эффект хорошо виден на рис. 1.

На рис. 3 и 4 представлено сравнение расчетных и измеренных задержек самовоспламенения при разных начальных температурах и давлени-

ях. Во всех случаях состав смеси — стехиометрический (1.33% $C_{10}H_{22}$ —воздух), а начальное давление P_0 равно 1, 12 и 50 ата. Точки на графиках соответствуют опытным данным работы [3] для давлений 12 и 50 ата, опытным данным из [11] для давлений 13 и 80 ата, опытным данным из [12] для давления 1 ата и опытным данным работ [13, 14] для давлений 10 и 40 ата, а кривые соответствуют результатам расчета. На рис. 5 проведено сравнение расчетных задержек самовоспламенения для стехиометрических воздушных смесей $n-C_8H_{18}$, $n-C_9H_{20}$ и $n-C_{10}H_{22}$ при одинаковых на-

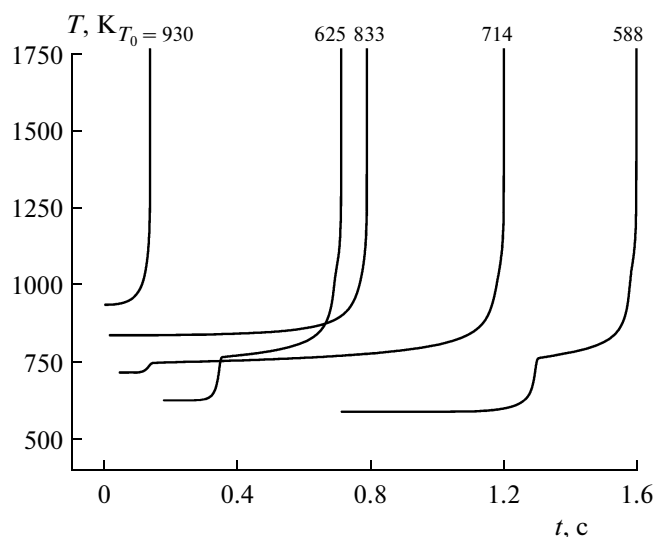


Рис. 1. Расчеты самовоспламенения стехиометрической n -декановоздушной смеси: зависимости температуры от времени. Начальные температуры $T_0 = 588, 625, 714, 833$ и 930 К, начальное давление $P_0 = 1$ ата.

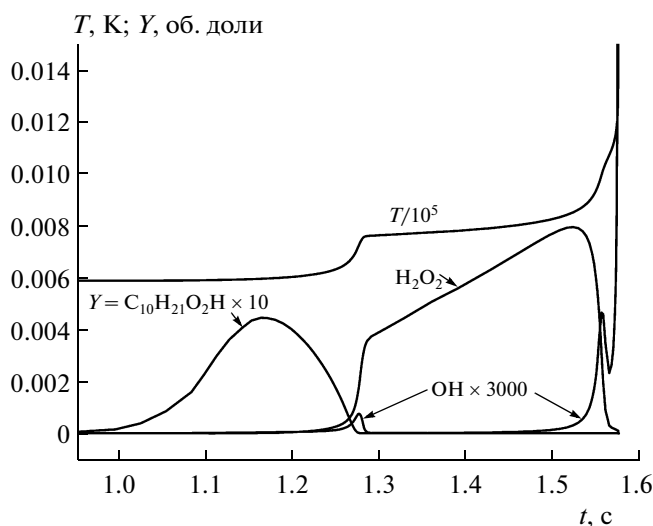


Рис. 2. Расчет самовоспламенения стехиометрической n -декановоздушной смеси: зависимости температуры, концентраций перекисей и гидроксила от времени. Начальная температура $T_0 = 588$ К, начальное давление $P_0 = 1$ ата.

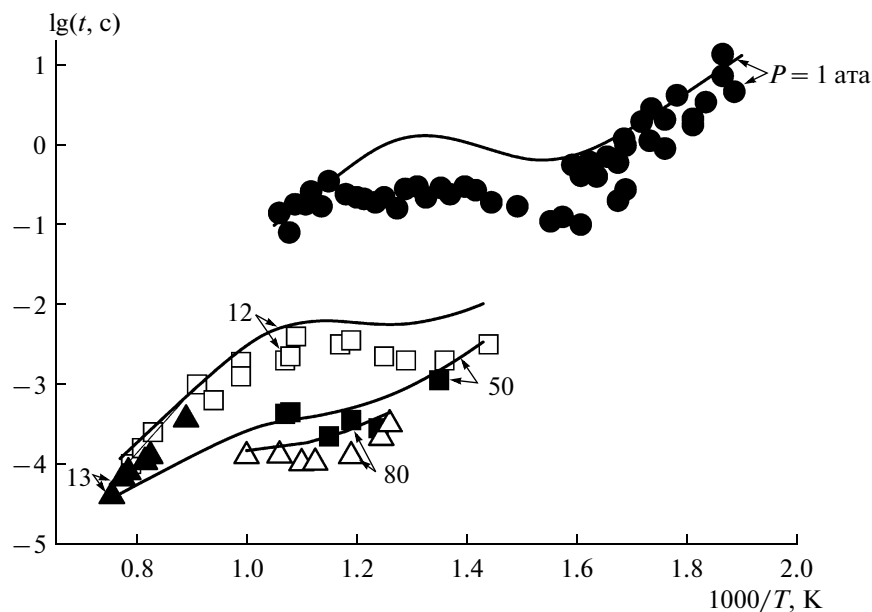


Рис. 3. Задержки самовоспламенения стехиометрической *n*-декановоздушной смеси при разных температурах и давлениях. Точки – эксперимент [3, 11, 12], кривые – расчет.

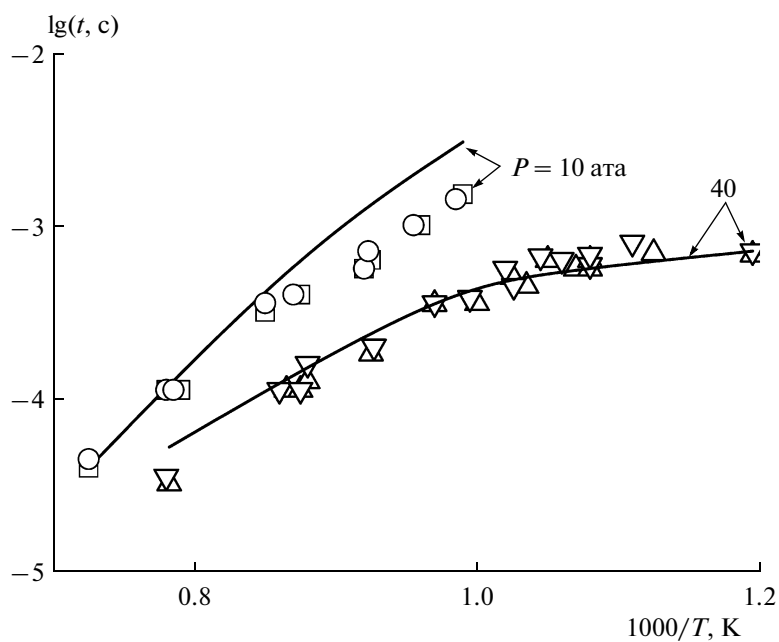


Рис. 4. Задержки самовоспламенения стехиометрической *n*-декановоздушной смеси при разных температурах и давлениях. Точки – эксперимент [13, 14], кривые – расчет.

чальных температурах и давлении $P_0 = 1$ ата. Видно, что при всех n задержки самовоспламенения с ростом температуры сокращаются, и во всех случаях проявляется ОТК скорости реакции. Аналогичные результаты получены и при более высоких давлениях.

Опыты по распространению ламинарного пламени

Дополнительно провели расчеты по определению скорости распространения ламинарного пламени u_n в воздушных смесях всех трех углево-

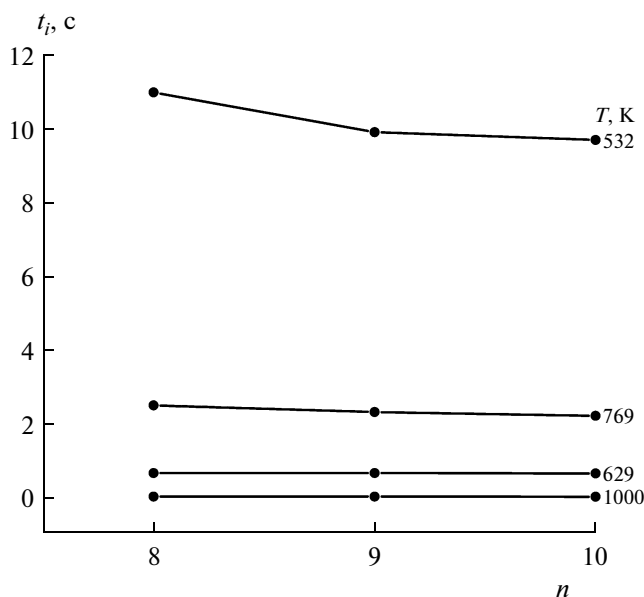


Рис. 5. Расчетные задержки самовоспламенения стехиометрических n -октано- ($n = 8$), n -нонано- ($n = 9$) и n -декановоздушных ($n = 10$) смесей при разных температурах; давление атмосферное.

дородов при атмосферном давлении и разных начальных температурах. Использовали методику, описанную в [15]. Сравнение расчетных значений u_n с опытными данными работ [16–19] представлено на рис. 6–8.

Опыты по самовоспламенению капель

Полученный ДКМ применили также к расчету самовоспламенения и горения капель. В основе расчета – одномерные нестационарные уравнения сохранения массы, химических компонентов и энергии для газовой и жидкой фазы с сопряжением решений на сферической поверхности капли. Детальное описание математической модели и методики расчета приведено в [20]. Вокруг капли задавали постоянную начальную температуру воздуха T_0 , а начальную температуру жидкости принимали равной 293 К. Радиус расчетной области R принимали достаточно большим по сравнению с начальным радиусом капли r_0 . Любому выбранному значению R соответствует определенное значение коэффициента избытка горючего Φ в однородной монодисперсной капельной газозвеси [20]. По истечении периода индукции в газе на некотором расстоянии от центра капли происходило самовоспламенение.

Задачу решали в широком диапазоне давлений, начальных температур воздуха и начальных составов смеси Φ как для одиночных капель разного начального диаметра, так и для однородных монодисперсных капельных газозвесей. Оказалось, что в расчетах проявлялась такая же многостадийность, как и при самовоспламенении газо-

вой смеси. Например, на рис. 9 показаны результаты расчета для капли n -декана начального диаметра 60 мкм.

Холодные пламена при самовоспламенении капельной струи ранее наблюдались экспериментально [21]. В [19] для одиночных капель измерены суммарный период индукции – t_s и период индукции холодного пламени – t_1 . На рис. 10 проведено сравнение расчетных и измеренных периодов индукции для капли n -декана начального диаметра 0.70 мм.

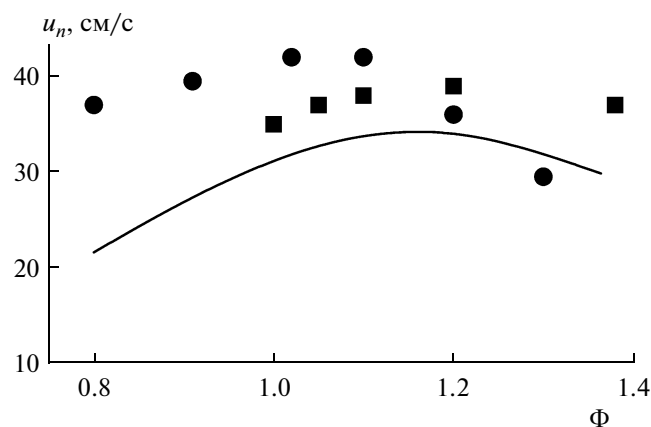


Рис. 6. Зависимость скорости распространения ламинарного пламени u_n от состава Φ . Смесь n -октана с воздухом, давление атмосферное, начальная температура $T_0 = 298$ К. Эксперименты: кружки – [16], квадраты – [17]. Кривая – расчет.

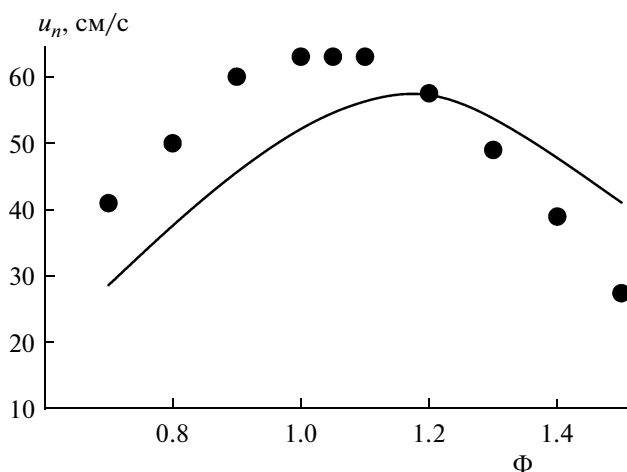


Рис. 7. Зависимость скорости распространения ламинарного пламени u_n от состава Φ . Смесь н-нонана с воздухом, давление атмосферное, начальная температура $T_0 = 403$ К. Точки – эксперимент [18], кривая – расчет.

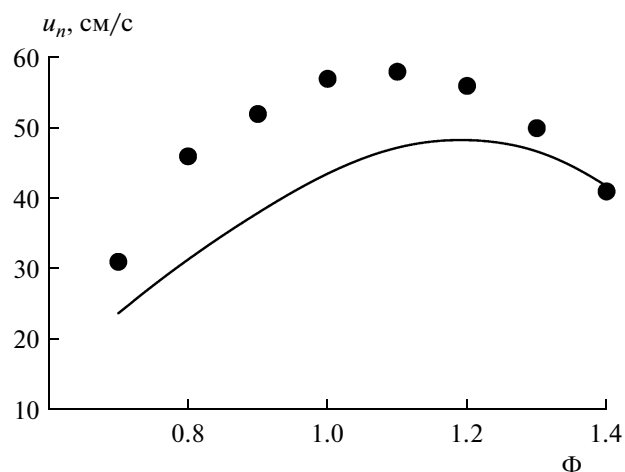


Рис. 8. Зависимость скорости распространения ламинарного пламени u_n от состава Φ . Смесь н-декана с воздухом, давление атмосферное, начальная температура $T_0 = 360$ К. Точки – эксперимент [19], кривые – расчет.

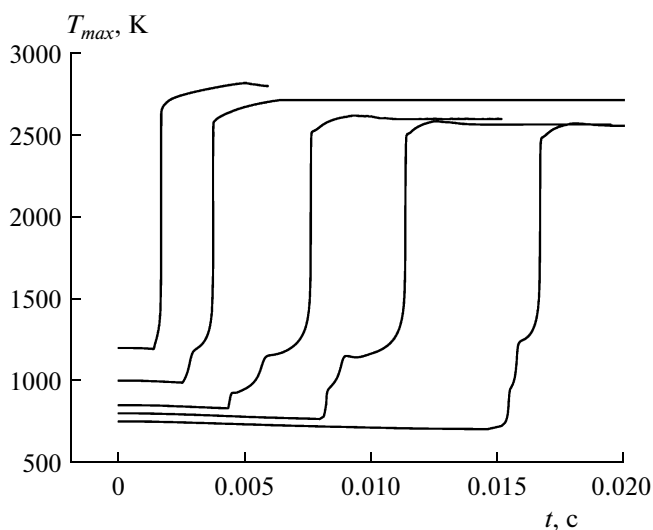


Рис. 9. Расчеты самовоспламенения стехиометрических капельных н-декановоздушных смесей: зависимости температуры от времени. Начальный диаметр капли – 60 мкм, начальные температуры $T_0 = 750, 800, 850, 1000$ и 1200 К, начальное давление $P_0 = 1$ ата.

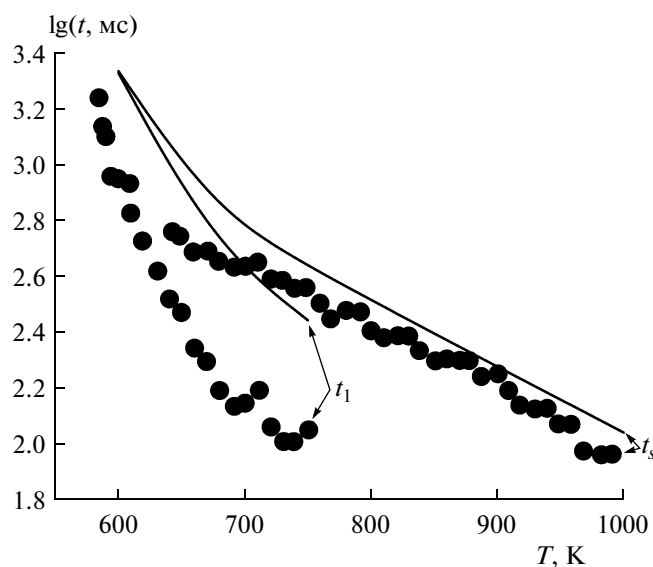


Рис. 10. Расчеты самовоспламенения капель н-декана в воздухе: зависимости задержек самовоспламенения от начальной температуры. Начальный диаметр капли – 0.70 мм, начальное давление $P_0 = 1$ ата. Точки – эксперимент [22], кривые – расчет.

По скорости регрессии квадрата диаметра капли можно определить значение так называемой константы скорости горения капли k , входящей в классическое выражение (известное как квадратичная зависимость диаметра капли от времени)

$$d^2 = d_0^2 - kt,$$

где $d_0 = 2r_0$ – начальный диаметр капли.

На рис. 11 представлено сравнение расчетной (линия) и измеренной (точки) зависимости квадрата диаметра капли d^2 от времени при самовоспламенении капли н-декана с начальным диаметром 0.91 мм. Задержка самовоспламенения соответствует времени от начала процесса ($t = 0$) до достижения максимума d^2 (рост диаметра капли на этом участке объясняется тепловым расшире-

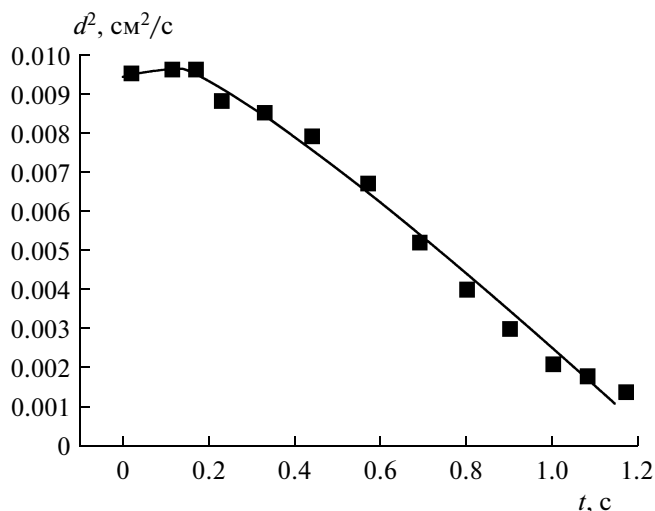


Рис. 11. Зависимость квадрата диаметра капли н-декана d^2 от времени при самовоспламенении и горении. Начальный диаметр капли – 0.91 мм, начальная температура $T_0 = 1093$ К, давление $P = 1$ ата. Точки – эксперимент [22], кривая – расчет.

нием жидкости). По убыли d^2 после достижения стационарности (прямой участок линии на рис. 11) можно судить о скорости горения капли. Видно, что расчетная скорость горения капли хорошо согласуется с измеренным значением.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе построены новые ДКМ окисления и горения н-октана, н-нонана и н-декана. Важнейшая особенность механизмов – проявление стадийности в виде холодных и голубых пламен при низкотемпературном самовоспламенении. Выполнены расчеты самовоспламенения и горения газовых смесей и капель углеводородов в воздухе в широком диапазоне начальных условий и проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными. В целом получено удовлетворительное качественное и количественное согласие результатов. В связи с этим можно говорить о правильности использованного в работе неэкстенсивного принципа построения кинетических механизмов с целевым ограничением многообразия продуктов и реакций, но сохранением основных каналов процесса и принципиально важных типов элементарных актов.

Работа выполнена при поддержке Министерством образования и науки (государственный

контракт П502) и Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 11-080-129-7а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chevalier C., Louessard P., Muller U.C., Warnatz J. // Joint meeting Sov. Ital. Sections Comb. Inst. Pisa, 1990. P. 5.
2. Buda F., Bounaceur R., Warth V. et al. // Combust. and Flame. 2005. V. 142. P. 170.
3. Pfahl U., Fieweger K., Adomeit G. // Proc. 26th Sympos. (Intern.) on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst., 1996. P. 781.
4. Соколик А.С. Самовоспламенение, пламя и детонация в газах. М.: Изд-во АН СССР, 1960.
5. Lewis B., Elbe G. Combustion, Flames and Explosions of Gases. Orlando: Acad. Press, 1987.
6. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Хим. физика. 2007. Т. 26. № 7. С. 37.
7. Басевич В.Я., Веденев В.И., Фролов С.М., Романович Л.Б. // Хим. физика. 2006. Т. 25. № 11. С. 87.
8. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Хим. физика. 2009. Т. 28. № 8. С. 59.
9. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 7 С. 71.
10. Басевич В.Я., Беляев А.А., Посвянский В.С., Фролов С.М. // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 12. С. 40.
11. Zhukov V.P., Sechenov V.A., Starikovskii A.Yu. // Combust. and Flame. 2008. V. 153. P. 130.
12. Трошин К.Я. // Хим. физика. 2008. Т. 27. № 6. С. 6.
13. Shen H.-P.S., Steinberg J., Vanderover J. et al. // Energy Fuels. 2009. V. 23. P. 2482.
14. Wang H., Warner S.J., Oehlschlaeger A. et al. // Combust. and Flame. 2010. V. 157. P. 1976.
15. Беляев А.А., Посвянский В.С. // Информ. бюлл. Госфонда алгоритмов и программ СССР. 1985. № 3(66). С. 35.
16. Gerstein M., Levin O., Wang E.L. // J. Amer. Chem. Soc. 1951. V. 73. № 1. P. 418.
17. Gibbs G.J., Calcote H.F. // J. Chem. Eng. Data. 1959. V. 4. P. 226.
18. Ji C., Dames E., Wang Y.L. et al. // Combust. and Flame. 2010. V. 157. P. 1976.
19. Kumar K., Sung C.J. // Combust. and Flame. 2007. V. 151. 209.
20. Басевич В.Я., Беляев А.А., Медведев С.Н. и др. // Хим. физика. 2010. Т. 29. № 12. С. 50.
21. Соколик А.С., Басевич В.Я. // ЖФХ. 1954. Т. 28. С. 1935.
22. Moriue O., Eigenbrod C., Rath H.J. et al. // Proc. Combust. Inst. 2000. V. 28. P. 969.