

синергизма при совместном действии этих ионов достигает рекордной величины  $\approx 10^4$  (при малых концентрациях этих ионов). Ускорение катализа ОС ионами железа в этом свободно-радикальном процессе достигается за счет участия ионов  $Mn(II)$  в цикле быстрых реакций продолжения цепи:  $SO_3^- + Mn(II) \xrightarrow{H^+} HSO_3^- + Mn(III)$ ,  $k_1 \geq 2 \times 10^8$ ;  $Mn(III) + HSO_3^- \rightleftharpoons Mn^{2+} + SO_3^- + H^+$ ,  $k_2 = 1.3 \times 10^6$  л моль<sup>-1</sup> с<sup>-1</sup> и его положительного влияния на скорость регенерации  $Fe(III)$  – участника стадии инициирования цепей:  $FeOH^{2+} + HSO_3^- \xrightarrow{k} FeOH_2H^+ \xrightarrow{k} Fe^{2+} + SO_3^- + H_2O$ . Двойное ускоряющее действие ионов марганца на скорость катализа ОС ионами железа и определяет второй порядок реакции по  $[Mn(II)]$ . Кажущаяся аномально высокой величина  $k_1 \geq 2 \times 10^8$  л моль<sup>-1</sup> с<sup>-1</sup> связана с внутрисферным механизмом переноса электрона в этой реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 98-03-33189а и № 00-05-64029).

### СТРУКТУРА ЛАМИНАРНОГО ДИФFUЗИОННОГО ПЛАМЕНИ ПРИ ГОРЕНИИ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ

*А.В.Евлампиев, В.Я.Басевич, А.А.Белая, С.М.Фролов*

Концепция микроламинарного пламени в задачах о турбулентном диффузионном горении газов позволяет учитывать конечную скорость химических реакций и взаимодействие химических процессов с турбулентным течением. Согласно этой концепции, изогнутая поверхность турбулентного пламени представляет собой ансамбль ламинарных поверхностей горения с локально одномерной структурой. По этой причине ламинарное диффузионное пламя стало предметом детальных теоретических и экспериментальных исследований. На практике такое горение можно наблюдать при столкновении соосных противоположенных ламинарных потоков горючего и окислителя. Численное решение задачи о ламинарном диффузионном горении углеводородного топлива не встречает принципиальных трудностей, если речь идет о легких углеводородах. Однако, при исследовании горения тяжелых углеводородов возникает проблема, связанная с недостаточной изученностью соответствующих механизмов химических реакций. Вместе с тем, для практических целей наибольший интерес представляют именно тяжелые углеводороды, являющиеся компонентами моторных топлив. Одним из эффективных путей решения проблемы может служить использование эмпирических схем окисления углеводородов.

Цель работы – проверка применимости эмпирического механизма окисления углеводородов [1, 2] к задачам диффузионного горения газов.

Плоская задача о стационарном диффузионном ламинарном пламени, образованном при столкновении соосных противоположенных потоков горючего и окислителя, может быть сведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Полученную систему уравнений решали методом Ньютона с использованием матричной прогонки.

Расчетные результаты для легких углеводородов (системы метан – кислород – азот, этилен – кислород – азот) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [3, 4]. При исследовании горения более тяжелых углеводородов (пропан, гептан, тетрадекан и т.д.) использование механизма окисления [1, 2] приводит к вычислительным трудностям. Показано, что для получения стационарного решения необходимо видоизменить механизм таким образом, чтобы тяжелое углеводородное топливо участвовало в реакциях неполного окисления и термического распада до низших углеводородов (этилен, ацетилен). Такой механизм оказался применимым как к диффузионному, так и к гомогенному горению.

Таким образом, в работе предложен модифицированный эмпирический механизм окисления углеводородов, позволяющий исследовать структуру пламени при горении

моторных топлив. Создана и апробирована методика расчета характеристик ламинарного диффузионного пламени в противонаправленных соосных потоках горючего и окислителя.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 99-03-32261).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. Химическая физика, 1998, №9, С.112.
2. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. Химическая физика, 1998, №10, С.71.
3. Sun C.J., Sung C.J., Wang H., Law C.K. Combustion and Flame, 1996, Vol.107, No. 4, P.321
4. Smooke M.D., Puri I.K., Seshadri K. Proc. 21<sup>st</sup> Symp. (Intern.) Combustion, Pittsburgh, The Combustion Institute, 1986, P.1783.

#### ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА

*Г.К. Иванов, В.Л. Боднева*

Взаимодействие ридберговского атома (РА) с поверхностью рассматривается как процесс многократного рассеяния слабосвязанного электрона неподвижными атомами поверхности и твердого тела. При этом могут учитываться структурные особенности поверхности и их влияние на сдвиги и расщепление уровней РА. Показано, что на расстояниях  $R$ , прилегающих к границе  $R_{cl}$  области классического движения электрона ( $R \approx R_{cl} = 2n^2$ , где  $n$  - главное квантовое число), возникает один сильно возмущаемый терм. Он формируется большой группой слабо взаимодействующих с ионным остовым РА состояний и может меняться в пределах, сопоставимых с расстоянием между ридберговскими уровнями ( $\Delta E \sim 1/n^3$ ). За счет этого термина возможно отражение медленных РА на больших расстояниях от поверхности ( $R \approx R_{cl}$ ), сопровождающееся перемещением высоких угловых моментов  $l$  ридберговского электрона и неадиабатическими переходами между группами сильно и слабо связанных с ионным остовом состояний.

Полученные результаты демонстрируют достаточно высокую чувствительность формируемой картины термов и определяемых ею процессов  $l$ -перемещения к структурным особенностям поверхности.

#### САЖЕОБРАЗОВАНИЕ ПРИ ПИРОЛИЗЕ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ В УДАРНЫХ ВОЛНАХ

*И.А. Власов, И.В. Жильцова, И.С. Заслонко,  
Ю.К. Кирасевич, В.Н. Смирнов*

Проведен большой объем экспериментальных исследований по образованию конденсированного углерода при пиролизе различных углеродсодержащих соединений в ударных волнах: углеводородов, галогензамещенных углеводородов,  $C_3O_2$ .

Анализ полученных данных и результатов исследований других авторов позволил выделить общие существенные черты, характерные для всех исследованных систем. В частности, было показано, что с учетом неизотермичности процесса пиролиза нижняя температурная граница активного сажеобразования во всех случаях примерно одинакова. Этот вывод позволил по-новому подойти к разработке кинетической модели этого сложного физико-химического процесса. Показано, что при моделировании, кроме доминировавшего в литературе механизма НАСА, необходимо учитывать и другие каналы роста частиц конденсированного углерода.

Среди экспериментальных результатов, полученных в ходе работы, следует отметить установление факта существования второго высокотемпературного максимума