

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И РАСЧЕТ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ МИКРОКАПЕЛЬ ТРИЭТИЛАЛЮМИНИЯ В ВОЗДУХЕ*

Н. М. Кузнецов¹, В. Я. Басевич², А. А. Беляев³, С. М. Фролов⁴, П. А. Стороженко⁵

Аннотация: На основе модельной схемы гетерогенного взаимодействия кислорода с микрокаплями горючего — триэтилалюминия (ТЭА) — с выходом легких углеводородных радикалов в газовую фазу составлена и реализована программа вычисления задержки воспламенения пространственно однородной смеси микрокапель горючего с воздухом. Вычисление выполнено с вариацией кинетических параметров, предназначенной для сравнения с экспериментом.

Ключевые слова: триэтилалюминий; реакция внедрения; константа скорости; энергия активации; микрокапля; задержка воспламенения; образование радикалов; детальная кинетика; вычислительная программа

DOI: 10.30826/CE19120411

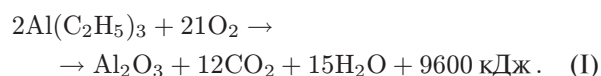
1 Введение

Триэтилалюминий $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ представляет собой прозрачную бесцветную жидкость с температурой кипения около 190°C . Его растворы сохраняют стабильность при условии хранения вдали от источников тепла в сухой инертной атмосфере, но при температуре выше 120°C ТЭА медленно разлагается с образованием водорода, этилена и элементарного алюминия. При контакте с воздухом ТЭА и его растворы в углеводородных растворителях воспламеняются, он бурно реагирует с водой [1, 2]. Согласно [2] измеренная температура вспышки ТЭА в воздухе равна $-52,78^\circ\text{C}$. Продуктами полного сгорания ТЭА и его растворов являются оксид алюминия, диоксид углерода и вода. Обращение с ТЭА и его растворами должно происходить только в сухой, инертной атмосфере, например азота или аргона.

Триэтилалюминий используется в качестве компонента катализатора Циглера–Натта для полимеризации олефинов [3]. Он также используется в реакциях с этиленом для роста углеводородных

радикалов у атома алюминия и, при последующем гидролизе образовавшихся высших алюминийалкилов, получения жирных α -спиртов. Кроме того, ТЭА используется в качестве алкилирующего реагента в синтезе других элементоорганических и органических соединений. Триэтилалюминий может применяться в качестве компонента ракетных топлив, в напалмах и зажигательных составах [4].

В экспериментах с жидким ТЭА, распыленным через форсунку в воздухе в виде микрокапель, наблюдается самовозгорание смеси [5]. Полному сгоранию ТЭА в воздухе соответствует суммарная реакция [5, 6]:



В сложном химическом процессе превращения исходных компонент в продукты реакции (1), в котором реагирующие компоненты участвуют во многих гетерогенных и газофазных элементарных реакциях, можно выделить две стадии: стадию самовоспламенения и стадию быстрого взрывного го-

* Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания по теме 0082-2016-0011 «Фундаментальные исследования процессов превращения энергоемких материалов и разработка научных основ управления этими процессами», номер государственной регистрации АААА-А17-117040610346-5, и субсидии, выделенной ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (выполнение фундаментальных научных исследований ГП 14) по теме № 0065-2019-0005 «Математическое моделирование динамических процессов в деформируемых и реагирующих средах с использованием многопроцессорных вычислительных систем» (номер государственной регистрации АААА-А19-119011590092-6).

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, N-M-Kuznetsov@yandex.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaev@chph.ras.ru

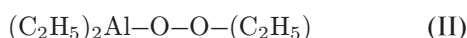
⁴Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

⁵ГНЦ РФ АО «Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений», bigpastor@mail.ru

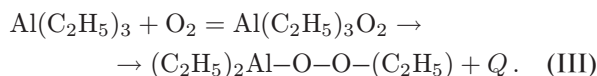
рения [5]. Данная работа посвящена теоретическому анализу первой стадии и вычислению задержки воспламенения (периода индукции). В прикладном отношении кинетический анализ первой стадии представляется наиболее важным, поскольку именно она в основном определяет время всего процесса.

2 Кинетическая модель самовоспламенения $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ в воздухе

Для кинетического анализа стадии самовоспламенения необходимо составить схему элементарных реакций. Первичной реакцией в схеме по определению должна быть гетерогенная реакция, происходящая при столкновениях молекул кислорода воздуха с микрокаплями горючего. Такая реакция, приводящая к самовоспламенению смеси, занимающей ограниченный объем, должна характеризоваться достаточно малой энергией активации. Предположительно, это может быть гетерогенная реакция внедрения молекулы кислорода с образованием молекулы



непосредственно при столкновении молекул горючего и кислорода, или путем образования промежуточного комплекса $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{O}_2$ по схеме:

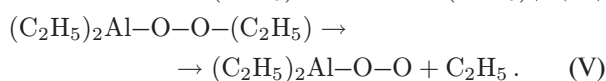
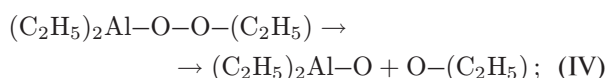


На основе такого предположения в [5] предложена кинетическая модель воспламенения ТЭА в воздухе, а константа скорости реакции (III) представлена в виде:

$$K_0 = A \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right), \quad (1)$$

где A — предэкспоненциальный множитель, зависящий от размера микрокапель ТЭА; T — температура; ε — температура активации.

Кинетическая модель учитывает два канала мономолекулярного распада молекулы (II):



Реакции (IV) и (V) происходят при столкновениях газофазных молекул с поверхностью микрокапель горючего (гетерогенные реакции). При этом

летучие легкие радикалы C_2H_5 и $(\text{C}_2\text{H}_5)\text{O}$ выйдут в газовую фазу (воздух) и там взаимодействуют с кислородом, порождая другие последовательные и параллельные реакции, такие же как при газофазной кинетике окисления, воспламенения и горения легких алканов (метана, этана и бутана) и их производных. Кинетические схемы, соответствующие уравнения химической кинетики, алгоритмы и программы, описывающие подобные газофазные процессы, существуют, и их можно использовать в качестве подпрограмм применительно к вариантам численного решения рассматриваемой задачи. Подчеркнем, что имеется в виду описание не всего процесса полного сгорания ТЭА, а только начальной стадии, на которой происходит самовоспламенение. На этой стадии размер и химический состав микрокапель и концентрация кислорода в газе изменяются мало, и их можно полагать постоянными. Решение задачи в такой постановке приведено в следующем разделе.

3 Задержки самовоспламенения смесей C_2H_5 –воздух и $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$ –воздух

Математическая постановка задачи представляет собой постановку классической задачи о самовоспламенении газовой смеси [7] с заданной детальной кинетикой [8], которая дополнена гетерогенным механизмом образования радикалов C_2H_5 (или $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$). Уравнения сохранения баланса тепла и массы компонент имеют вид:

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = \Phi; \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial Y_j}{\partial t} = w_j + \Psi, \quad j = 1, 2, \dots, M, \quad (3)$$

где t — время; M — количество компонент в газовой смеси; Y_j — массовая доля j -го компонента; c_p — теплоемкость газовой смеси при постоянном давлении; ρ — плотность смеси; Φ — тепловыделение в химической реакции; w_j — расход компонента j в химической реакции; Ψ — образование компонента C_2H_5 (или $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$) в реакции (V) (или (IV)).

Система (2)–(3) дополняется уравнением состояния идеального газа, выражениями для Φ и w_j [9] и видом полиномиальной зависимости для теплоемкости, причем сами коэффициенты при полиноме берутся из [10].

По сравнению с обычной постановкой задачи о самовоспламенении газовой смеси абсолютно новым является выражение для Ψ и все другие соображения, связанные с этим обстоятельством. Считается, что сначала смесь представляет собой воздух, а компонент C_2H_5 (или C_2H_5O) появляется в газе за счет гетерогенной реакции (V) (или (IV)). Задержки воспламенения зависят от скоростей образования радикалов C_2H_5 и C_2H_5O в гетерогенных реакциях (V) и (IV) и от скоростей их взаимодействия с кислородом в газовой фазе. Полагая, что скорости образования радикалов по порядку величины одинаковы, для определения влияния этих радикалов на задержку воспламенения будем далее решать задачу в двух вариантах: (1) для смеси C_2H_5 –воздух и (2) для смеси C_2H_5O –воздух.

Вариант 1: смесь C_2H_5 –воздух

Выражение для Ψ имеет вид:

$$\Psi = \begin{cases} W_{C_2H_5} \frac{\partial n_{C_2H_5}^*}{\partial t} & \text{для } C_2H_5; \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases} \quad (4)$$

Здесь $W_{C_2H_5}$ — молекулярная масса C_2H_5 , $\partial n_{C_2H_5}^*/\partial t$ — скорость изменения концентрации (моль/см³/с) радикалов C_2H_5 в гетерогенной реакции (V), которая в соответствии с (1) удовлетворяет уравнению [5]:

$$\frac{\partial n_{C_2H_5}^*}{\partial t} = K_0 n_{O_2}, \quad (5)$$

где n_{O_2} — число молей кислорода в единице объема (моль/см³). Явное выражение для K_0 имеет вид [5]:

$$K_0 = 0,25 \lambda u S_0 N_r \exp\left(-\frac{\varepsilon}{T}\right),$$

где u — средняя тепловая скорость молекул кислорода:

$$u = u_0 \sqrt{\frac{T}{T_*}};$$

S_0 — площадь поверхности микрокапли ТЭА; N_r — число микрокапель в единице объема.

Приведенные выше параметры имеют следующие значения: $\lambda = 0,1$; $u_0 = 4,46 \cdot 10^4$ см/с; $T_* = 273$ К; $S_0 = 3,14 \cdot 10^{-4}$ см²; $N_r = 210$ см⁻³ [5]. Параметр ε будет варьироваться для сравнения расчета задержки воспламенения (периода индукции) с предполагаемым экспериментом.

Начальные условия: $t = 0$; $T = 300$ К; давление $p = 1$ атм; объемные доли кислорода и азота $X_{O_2} = 0,21$ и $X_{N_2} = 0,79$. Все остальные компоненты: $X_j = 0$; $n_{C_2H_5}^* = 0$; $n_{O_2} = X_{O_2}/22400 = 9,37 \cdot 10^{-6}$ моль/см³.

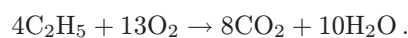
Вариант 2: смесь C_2H_5O –воздух

В этом варианте решается та же система уравнений, что и в Варианте 1, но в формулах (4) и (5) всюду в строках и в индексах C_2H_5 должно быть заменено на C_2H_5O . Для решения этих двух вариантов задачи разработана специальная вычислительная программа.

4 Задержки самовоспламенения стехиометрических смесей C_2H_5 –воздух и C_2H_5O –воздух

Перед тем как проводить расчеты Вариантов 1 и 2 нами вычислены задержки самовоспламенения стехиометрических смесей C_2H_5 –воздух и C_2H_5O –воздух в отсутствие гетерогенных реакций, т. е. при $\Psi_{C_2H_5} = \Psi_{C_2H_5O} = 0$.

Обобщенная запись для реакции C_2H_5 с кислородом имеет вид:



Стехиометрический состав смеси C_2H_5 –воздух: $X_{C_2H_5} = 0,061$; $X_{O_2} = 0,197$; $X_{N_2} = 0,742$. Расчет задержек самовоспламенения проведен для смеси C_2H_5 –воздух стехиометрического состава при нормальных условиях: $T_0 = 300$ К и $p = 1$ атм.

Задержки самовоспламенения, полученные с использованием разработанной кинетической программы, сравнили с результатами расчета по стандартной кинетической программе KINET, разработанной в ИХФ РАН М. Г. Нейгауз для гомогенных газовых смесей [11]. В обоих случаях использовали одинаковый кинетический механизм — детальный кинетический механизм горения и окисления алканов до C_4 [8]. Следует иметь в виду, что в программе KINET использованы несколько иные термодинамические данные: полиномиальная зависимость теплоемкости от температуры имеет меньше членов, чем в [10].

В табл. 1 приведены значения задержек самовоспламенения τ_i , температуры продуктов реакции T_e , объемных долей радикала C_2H_5 , кислорода и воды в смеси продуктов, а также максимальное значение объемной доли метана, полученные расчетом по двум указанным программам.

На рис. 1, а приведены зависимости температуры от времени, полученные в расчетах по двум указанным программам. И данные табл. 1, и кривые на

Таблица 1 Расчетные значения основных характеристик

Программа	τ_i , с	T_e , К	$(X_{C_2H_5})_e$	$(X_{O_2})_e$	$(X_{H_2O})_e$	$(X_{CH_4})_{max}$
Новая	0,10	2455	0	0,007	0,14	0,0053
KINET	0,09	2336	0	0,010	0,13	0,0057

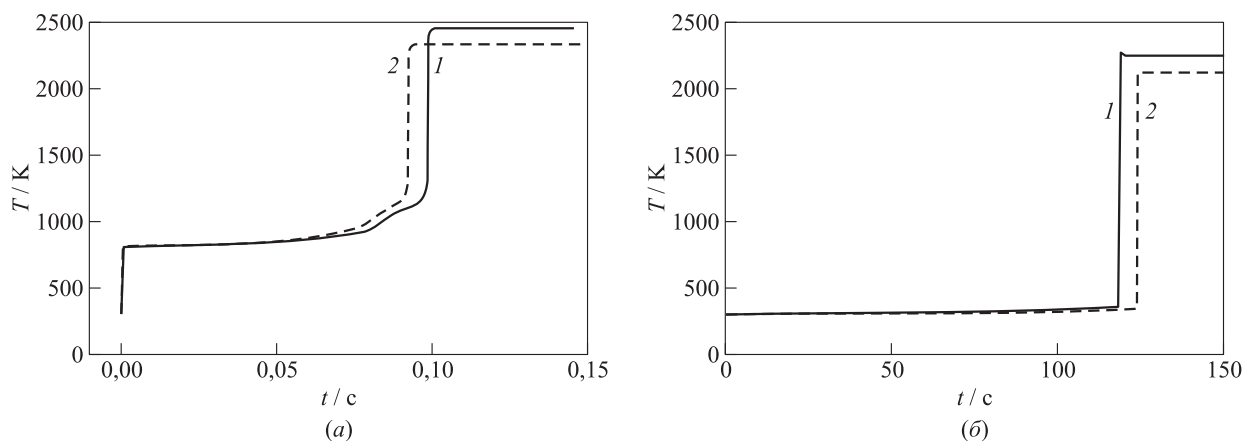
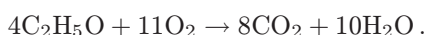

Рис. 1 Расчетные зависимости температуры от времени при самовоспламенении смесей C_2H_5 –воздух (а) и C_2H_5O –воздух (б) стехиометрического состава при использовании новой программы (1) и программы KINET (2)

рис. 1, а удовлетворительно согласуются друг с другом. Небольшое отличие результатов, по-видимому, объясняется различием в используемых термодинамических данных.

Затем проведен расчет задержек самовоспламенения смеси C_2H_5O –воздух стехиометрического состава при нормальных условиях: $T_0 = 300$ К и $p = 1$ атм.

Обобщенная запись для реакции C_2H_5O с кислородом имеет вид:



Стехиометрический состав смеси C_2H_5O –воздух: $X_{C_2H_5O} = 0,063$, $X_{O_2} = 0,172$, $X_{N_2} = 0,765$.

На рис. 1, б показана расчетная зависимость температуры от времени для смеси C_2H_5O –воздух. При расчете по новой программе задержка самовоспламенения составила $\tau_i = 118$ с, а по программе KINET — $\tau_i = 124$ с, т. е. результаты отличаются менее, чем на 5%.

5 Самовоспламенение микрокапель триэтилалюминия в воздухе

Численное решение задачи для Варианта 1 (см. разд. 3) проводили при нескольких значениях ε : от 1000 до 3000 К. Значения остальных параметров указаны в разд. 3. Там же отмечено, что исходная

Таблица 2 Задержки самовоспламенения для Варианта 1

ε , К	τ_i , с
1000	0,045
2000	0,62
2500	2,6
3000	11,1

газовая смесь — это воздух (79% N_2 + 21% O_2) при нормальных условиях.

Расчеты показывают, что задержка самовоспламенения τ_i очень сильно зависит от параметра ε (табл. 2). На рис. 2 показаны расчетные зависимости температуры от времени в пределах $0 \leq t \leq \tau_i$ при $\varepsilon = 2500$ и 3000 К. Верхнее ограничение указанного интервала времени связано с тем, что при $t > \tau_i$ становятся существенными реакции, ведущие к полному выгоранию ТЭА, которые не включены в используемую систему уравнений. На рис. 3 представлена зависимость концентрации $n_{C_2H_5}^*$ от времени при $\varepsilon = 3000$ К.

Расчет задачи для Варианта 2 (смесь C_2H_5O –воздух) проводился при значении $\varepsilon = 3000$ К. Поведение температуры смеси в зависимости от времени качественно остается таким же, как и в Варианте 1, но задержка самовоспламенения теперь составляет 201 с, т. е. примерно в 20 раз больше, чем для смеси C_2H_5 –воздух.

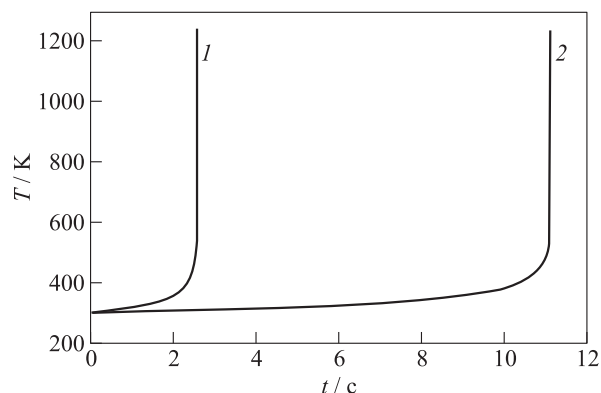


Рис. 2 Расчетные зависимости температуры от времени при самовоспламенении смеси C_2H_5 –воздух стехиометрического состава с учетом гетерогенной реакции при $\varepsilon = 2500$ (1) и 3000 К (2)

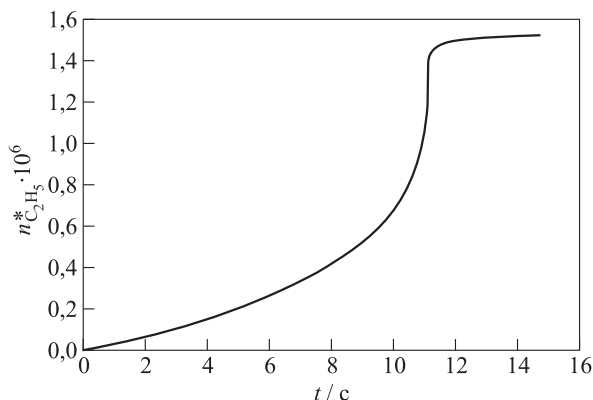


Рис. 3 Расчетная зависимость концентрации радикалов C_2H_5 в гетерогенной реакции от времени при $\varepsilon = 3000$ К

6 Обсуждение результатов и выводы

Таким образом, расчеты показывают, что задержка самовоспламенения у стехиометрической смеси C_2H_5O –воздух значительно больше, чем у стехиометрической смеси C_2H_5 –воздух. Это указывает на значительно большую реакционную способность радикала C_2H_5 в воздухе по сравнению с радикалом C_2H_5O . Вариация энергии активации ε проведена для дальнейшего сравнения с измерениями на стенде.

Кинетическая модель с реакцией внедрения молекулы кислорода представляется правдоподобной в связи с непреложным экспериментальным фактом самовоспламенения жидкого ТЭА при контакте с воздухом. Однако существование такой реакции и ее предполагаемая роль в процессе самовоспламенения пока остаются недоказанными. Например, в [2] на основе молекулярно-динамического моделирования реакции ТЭА (в конденсированной фазе) с газообразным кислородом при температуре выше 2000 К сделано предположение, что реакция начинается с быстрого отрыва атома водорода молекулой кислорода с образованием в газовой фазе радикала HO_2 , а впоследствии и молекул H_2 (последнее связывают с влажностью воздуха), т. е. быстрое протекание реакций в газовой фазе связывают с большой реакционной способностью водорода. Для кинетических параметров A и ε в аналоге формулы (1) получены значения $9,67 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ и $(1242/8,314) \approx 150$ К соответственно. На вопрос о том, какой же механизм реализуется на самом деле, можно будет ответить только после проведения эксперимента. Отметим, что предложенная нами модель, даже если она не реализуется приме-

нительно к самовоспламенению ТЭА, может быть применена к другим реакциям, константа скорости которых зависит от температуры по закону Аррениуса.

Литература

1. Marsel J., Kramer L. Spontaneous ignition properties of metal alkyls // Symposium (International) on Combustion, 1958. Vol. 7. No. 1. P. 906–912. doi: 10.1016/S0082-0784(58)80135-6.
2. Gonçalves R. F. B., Iha K., Rocco J. A. F. F. Reactive molecular dynamics simulation and chemical kinetic evaluation of combustion of triethylaluminium (TEA) // Quim. Nova, 2018. Vol. 41. No. 5. P. 507–511 doi: 10.21577/0100-4042.20170200.
3. Sydora O. L. Selective ethylene oligomerization // Organometallics, 2019. Vol. 38. P. 997–1010. doi: 10.1021/acs.organomet.8b00799.
4. Davis S. M., Yilmaz N. Thermochemical analysis of hypergolic propellants based on triethylaluminium/nitrous oxide // Int. J. Aerospace Eng., 2014. Vol. 2014. Article ID 269836. 5 p. doi: 10.1155/2014/269836.
5. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А., Шамшин И. О. Кинетическая модель окисления и воспламенения $Al(C_2H_5)_3$ в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 3. С. 91–97.
6. Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Стороженко П. А. Расчет стандартной энтальпии образования и теплоты полного сгорания триэтилалюминия в водяном паре и в воздухе // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 2. С. 10–13. doi: 10.30826/CE19120202.
7. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980. 478 с.
8. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных алкановых углево-

- дородов. Переход от C_1 – C_3 к C_4H_{10} // Хим. физика, 2007. Т. 26. № 7. С. 37–44.
9. Вильямс Ф. А. Теория горения / Пер. с англ. — М.: Наука, 1971. 615 с. (*Williams F. A. Combustion theory*. — Addison-Wesley Publishing Co., 1965. 447 p.)
10. Burcat A. Thermodynamic data at the Web site of the Laboratory for Chemical Kinetics. Ideal gas thermo-
- dynamic data in polynomial form for combustion and air pollution use, 2005. <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>.
11. Азатян В. В., Коган А. М., Нейгауз М. Г., Поройкова А. И., Александров Е. Н. Роль саморазогрева при горении водорода вблизи первого предела воспламенения // Кинетика и катализ, 1975. Т. 16. № 3. С. 577–585.

Поступила в редакцию 02.04.19

KINETIC MODEL AND CALCULATION OF SELF-IGNITION OF TRIETHYL ALUMINUM MICRODROPLETS IN AIR

N. M. Kuznetsov¹, V. Ya. Basevich¹, A. A. Belyaev¹, S. M. Frolov^{1,2,3}, and P. A. Storozhenko⁴

¹N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

²National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation

³Scientific Research Institute for System Analysis, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, Russian Federation

⁴State Research Center “State Scientific Research Institute of Chemistry and Technology of Organo-Element Compounds,” 38 Entuziastov Shosse, Moscow 105118, Russian Federation

Abstract: Based on the model of heterogeneous interaction of oxygen with microdroplets of triethyl aluminum (TEA) resulting in the release of light hydrocarbon radicals into the gas phase, a computer code is developed and used for parametric calculations of the ignition delay of a spatially uniform mixture of TEA microdroplets in air. The calculations are performed with a variation of the kinetic parameters of the rate limiting reaction and are intended for further comparison with experiments.

Keywords: triethyl aluminum; interstitial reaction; rate constant; activation energy; microdroplets; ignition delay; radical formation; detailed kinetics; computer code

DOI: 10.30826/CE19120411

Acknowledgments

This work was supported by the subsidy given to the N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences to implement the state assignment on the topic No. 0082-2016-0011 “Fundamental studies of conversion processes of energetic materials and development of scientific grounds of controlling these processes” (Registration No. AAAA-A17-117040610346-5) and to the Scientific Research Institute for System Analysis to implement the state assignment on the topic No. 0065-2019-0005 “Mathematical modeling of dynamic processes in deformed and reactive media using multiprocessor computational systems” (Registration No. AAAA-A19-119011590092-6).

References

- Marsel, J., and L. Kramer. 1958. Spontaneous ignition properties of metal alkyls. *Symposium (International) on Combustion* 7(1):906–912. doi: 10.1016/S0082-0784(58)80135-6.
- Gonçalves, R. F. B., K. Iha, J. A. F. F. Rocco. 2018. Reactive molecular dynamics simulation and chemical kinetic evaluation of combustion of triethylaluminium (TEA). *Quim. Nova* 41(5):507–511 doi: 10.21577/0100-4042.20170200.
- Sydora, O. L. 2019. Selective ethylene oligomerization. *Organometallics* 38:997–1010. doi: 10.1021/acs.organomet.8b00799.
- Davis, S. M., and N. Yilmaz. 2014. Thermochemical analysis of hypergolic propellants based on triethylaluminum/nitrous oxide. *Int. J. Aerospace Eng.* 2014:269836. 5 p. doi: 10.1155/2014/269836.

5. Kuznetsov, N. M., S. M. Frolov, P. A. Storozhenko, and I. O. Shamshin. 2019. Kineticheskaya model' okisleniya i vosplamneniya $\text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ v vozdukhe [Kinetic model of oxidation and self-ignition of triethyl aluminum in air]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 12(3):91–97.
6. Kuznetsov, N. M., S. M. Frolov, and P. A. Storozhenko. 2019. Raschet standartnoy ental'pii obrazovaniya i teplo-ty polnogo sgoraniya trietilaluminia v vodyanom pare i v vozdukhe [Calculation of the standard enthalpy of formation and heat of complete combustion of triethylaluminum in water vapor and in air]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 12(2):10–13. doi: 10.30826/CE19120202.
7. Zel'dovich, Ya. B., G. I. Barenblatt, V. B. Librovich, and G. M. Makhviladze. 1980. *Matematicheskaya teoriya gorenii i vzryva* [Mathematical theory of combustion and explosion]. Moscow: Nauka. 478 p.
8. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, and S. M. Frolov. 2007. The mechanisms of oxidation and combustion of normal alkane hydrocarbons: The transition from C_1 – C_3 to C_4H_{10} . *Russ. J. Phys. Chem. B* 2(5):477–484.
9. Williams, F. A. 1965. *Combustion theory*. Addison-Wesley Publishing Co. 447 p.
10. Burcat, A. 2005. Thermodynamic data at the Web site of the Laboratory for Chemical Kinetics. Ideal gas thermodynamic data in polynomial form for combustion and air pollution use. Available at: <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html> (accessed November 29, 2019).
11. Azatyan, V. V., A. M. Kogan, M. G. Neigauz, A. I. Poroi-kova, and E. N. Aleksandrov. 1975. Rol' samorazogreva pri gorenii vodoroda vblizi pervogo predela vosplamneniya [The role of self-heating during the combustion of hydrogen near the first ignition limit]. *Kinet. Catal.* 16(3):577–585.

Received April 2, 2019

Contributors

Kuznetsov Nikolay M. (b. 1929) — Doctor of Science in physics and mathematics, professor, chief research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; n-m-kuznetsov@yandex.ru

Basevich Valentin Ya. (b. 1926) — Doctor of Science in technology, professor; chief research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow, 119991, Russian Federation; basevich@chph.ras.ru

Belyaev Andrey A. (b. 1954) — Candidate of Science in physics and mathematics, leading research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow, 119991, Russian Federation; belyaevIHF@yandex.ru

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, head of laboratory, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; senior research scientist, Scientific Research Institute for System Analysis, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovskii Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

Storozhenko Pavel A. (b. 1950) — Doctor of Science in chemistry, professor, Academician of the Russian Academy of Sciences, director, State Research Center “State Scientific Research Institute of Chemistry and Technology of Organo-Element Compounds,” 38 Entuziastov Shosse, Moscow 105118, Russian Federation; bigpastor@mail.ru