# ———— ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ ———

УДК 533.6.07

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ НА САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ БЕДНЫХ СМЕСЕЙ ВОДОРОДА С ВОЗДУХОМ

# © 2023 г. А. М. Тереза<sup>1\*</sup>, Г. Л. Агафонов<sup>1</sup>, Э. К. Андержанов<sup>1</sup>, А. С. Бетев<sup>1</sup>, С. П. Медведев<sup>1</sup>, С. В. Хомик<sup>1</sup>, Т. Т. Черепанова<sup>1</sup>

 $^{1}$  $\Phi$ едеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук,

Москва, Россия \*E-mail: tereza@chph.ras.ru Поступила в редакцию 11.08.2022; после доработки 12.09.2022; принята в печать 20.09.2022

Проведено численное моделирование влияния примесей атомов, молекул и радикалов на самовоспламенение бедных (14%  $H_2$ ) и ультрабедных (6%  $H_2$ ) смесей водорода с воздухом в диапазоне температур от 800 до 1700 К при давлениях 1 и 6 атм. Расчеты показывают, что добавление H, O, OH,  $HO_2$  и  $H_2O_2$  сокращает время задержки воспламенения –  $\tau$ . Выявлены общие тенденции влияния примесей на самовоспламенение смесей в зависимости от температуры. Для каждой примеси наиболее сильное влияние обнаружено при температурах, близких к 900 и 1100 К, при давлениях 1 и 6 атм соответственно. Показано, что степени влияния примесей O и H практически одинаковы. Влияние примеси  $HO_2$  на температурную зависимость задержки воспламенения значительно слабее по сравнению с другими примесями, но эта зависимость качественно совпадает с таковой для  $H_2O_2$ . Хотя степень сокращения задержки воспламенения и убывает для всех примесей по мере приближения к концам исследованного интервала температур, сохраняется заметное влияние радикала OH в высокотемпературной части и примесей  $HO_2$  и  $H_2O_2$  в низкотемпературной. Добавление до 1% воды не влияет на величину  $\tau$ .

*Ключевые слова:* бедная водородно-воздушная смесь, самовоспламенение, задержка воспламенения, численное моделирование, химическая кинетика, детальный кинетический механизм. **DOI:** 10.31857/S0207401X23030172, **EDN:** NCWLUS

# введение

Влияние примесей на кинетику воспламенения смесей водорода с кислородом или воздухом является актуальной проблемой при развитии технологий водородной энергетики [1, 2]. В первую очередь присутствие примесей может сказываться на условиях самовоспламенения водородно-воздушных смесей и скорости распространения пламени в них [1, 3-5]. Плохо или совсем не контролируемые примеси способны приводить к непредсказуемому развитию горения из очагов воспламенения и, как следствие, к аварийным ситуациям. В настоящее время наблюдается огромный разброс экспериментальных и расчетных значений времени задержки воспламенения, т, – основной характеристики самовоспламенения смесей Н<sub>2</sub>-О<sub>2</sub> [6]. Одна из причин такого расхождения – недостаточно полный учет влияния примесей [6-11]. Следует отметить, что в отдельных работах рассматривалось влияние добавок химически инертных веществ [12], которые при определенных условиях могут стать активными.

Примеси в смесях водорода с кислородом могут появляться в результате гетерогенных реакций молекулярных водорода и кислорода на поверхности [6-8, 13, 14]. Одним из продуктов гетерогенных реакций компонентов смеси Н<sub>2</sub>-воздух на различных поверхностях является H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> [7, 8, 15-20]. Экспериментально установлено, что при напуске в реактор смеси Н2-О2 с повышением температуры на поверхности его стенок образуется перекись водорода, парциальное давление которой в газовой фазе составляет несколько Торр [17]. Влияние H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> на самовоспламенение горючих смесей рассмотрено в работах [1, 7, 8, 15, 19]. Реакции на стенках, продуктом которых является H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, протекают с выделением тепла. В результате образуются продукты ОН и НО<sub>2</sub> [17, 18], которые также можно рассматривать как примеси.

В работах [13, 14] на основе экспериментальных данных по образованию атомов кислорода в ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ

гетерогенных реакциях на поверхностях [21, 22] методом численного моделирования была проведена оценка влияния примесей атомов О на скорость распространения пламени в смесях Н<sub>2</sub>-воздух при комнатной температуре. Было установлено, что наличие атомов кислорода в количестве, не превышающем долей процента, не приводит к заметному повышению скорости распространения пламени. В то же время присутствие озона сокращает период индукции, не влияя на тепловыделение или термодинамические характеристики, например на скорость Чепмена-Жуге [23]. Экспериментально установлено, что добавление озона в количестве до 3000 ррт приводит к уменьшению размера детонационной ячейки на величину до 70% [23].

В работе [10] посредством численного моделирования собственных экспериментальных данных по влиянию "остаточных" примесей атомов Н, О, ОН на задержку воспламенения за отраженными ударными волнами было установлено, что роль подобных примесей возрастает по мере снижения температуры и давления. В целом в [10] был сделан вывод, что влияние атомов Н на величину  $\tau$  незначительно. В более позднем исследовании влияния атомов Н на задержку воспламенения при давлениях от 1.2 до 16 атм [24] сравнение собственных экспериментальных данных и результатов численного моделирования на основе различных детальных кинетических механизмов (ДКМ) показало, что наилучшее согласие достигается при использовании ДКМ из работы [25]. Заметного влияния атомов Н на определяемую величину τ, как и в [10], авторы работы [24] не обнаружили, в то же время отметив сильную зависимость измеренного значения задержки воспламенения от давления. В работе [26] показано, что при T > 1000 К влияние "остаточных" углеводородных примесей на воспламенение смесей Н<sub>2</sub>-О<sub>2</sub> незначительно.

Несмотря на то, что многие исследователи отмечают значение влияния примесей на самовоспламенение и горение водородно-воздушных смесей, большинство работ, связанных с изучением данного явления, ограничены численным моделированием с использованием различных кинетических механизмов. Это обусловлено сложностью количественных экспериментальных методов и неоднородностью концентраций примесей, особенно в условиях турбулентности. В исследованиях структуры и динамики турбулентности отмечается важная роль так называемых выбросов (bursts) быстрых перемещений относительно небольших объемов газа от стенки во внешнюю область турбулентного пограничного слоя [27, 28]. В результате в газовой фазе могут возникать области с повышенными концентрациями примесей, образующихся на стенке. Последствием этого может быть как промотирование, так и ингибирование процессов самовоспламенения и горения в локальных зонах. Методы эмиссионной спектроскопии, используемые для регистрации электронно-возбужденных радикалов и молекул, обладая высокой чувствительностью [29, 30], позволяют обнаружить примеси при воспламенении водородновоздушных смесей, но не дают достоверных количественных оценок их влияния на исследуемый процесс.

Для понимания механизма образования примесей О, Н, ОН, Н<sub>2</sub>О<sub>2</sub> важно изучение гетерогенных реакций на различных твердых поверхностях. В обзоре [31] рассмотрены кинетические механизмы образования радикалов и молекул в реакциях низших алканов на различных каталитических поверхностях. На основе экспериментальных и теоретических исследований гетерогенных процессов в [31] показано, что металлические поверхности способны вызывать многоцентровую хемосорбцию - процесс, при котором несколько атомов водорода абсорбируются и связываются с поверхностью. Кроме того, свободный радикал может образовываться в результате гомолитической диссоциации связи R-H на металлическом активном центре с высоким сродством к атому водорода. Образующийся свободный радикал R имеет высокую реакционную способность при взаимодействии с поверхностью, что приводит к выходу в газовую фазу различных атомов и радикалов. Дополнительным фактором каталитического образования О, Н, ОН, Н<sub>2</sub>О<sub>2</sub> является присутствие воды, абсорбированной на поверхности. Хотя обзор [31] посвящен гетерогенным реакциям низших алканов на каталитических поверхностях, подобные кинетические механизмы могут описывать реакции в смесях водород-воздух. Поскольку количество активных центров и их физико-химические свойства в реальных технологических установках неизвестны, определить концентрации образующихся примесей O, H, OH, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> на поверхности и в объеме не представляется возможным. Как следствие, приходится пользоваться грубыми оценками концентраций примесей.

В случае аварийных ситуаций на АЭС вследствие радиолиза воды, помимо молекулярного водорода, в объеме могут присутствовать в малых количествах "остаточные" примеси О, Н, ОН,  $HO_2$  и  $H_2O_2$  [32–34]. Кроме того, гетерогенные реакции на нагретых каталитических покрытиях рекомбинаторов, удаляющих водород, также способны генерировать атомы, радикалы и молекулы O, H, OH,  $HO_2$  и  $H_2O_2$ . В настоящей работе посредством численного моделирования исследуется влияние указанных примесей на самовоспламенение водородно-воздушных смесей применительно к требованиям пожаро- и взрывобезопасности на АЭС.

# МЕТОДИКА ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Все расчеты проведены с помощью программного модуля CHEMKIN-Pro, входящего в пакет ANSYS (Academic version) [35]. Технологические особенности обеспечения пожаро- и взрывобезопасности на АЭС определяют параметры выполненных расчетов, которые осуществлялись при постоянном объеме и давлениях 1 и 6 атм. Выбор большего давления соответствует условию перехода от "медленного" (дозвукового) режима горения к "быстрому" (со скоростью звука) [36]. В работе [37] было показано, что в температурном диапазоне от 800 до 1700 К при давлениях 1 и 6 атм численное моделирование с использованием различных ДКМ предсказывает значения задержки воспламенения, различающиеся не более чем в четыре раза для разных кинетических моделей. Поэтому в настоящей работе для оценки влияния примесей использовался только один ДКМ [11]. Рассматривалось самовоспламенение однородной газовой смеси при температурах от 800 до 1700 К. Этот интервал включает в себя температуру, при которой происходит смена ведущих реакций в кинетике воспламенения смесей Н<sub>2</sub>-воздух, известная в литературе как кроссовер [38]. Теплопередача и гетерогенные процессы не учитывались.

Данные по концентрациям возможных примесей имеют большой разброс значений, что обусловлено целым рядом причин, к которым относятся сложность измерений, сильная зависимость гетерогенных процессов от физико-химических условий их протекания, тип и концентрация активных центров на поверхности [39-41]. В представленной работе в качестве примесей рассматриваются атомы, молекулы и радикалы, играющие наиболее существенную роль в кинетике реакций в смесях Н<sub>2</sub>-воздух вблизи нижнего концентрационного предела. В первую очередь необходимо выяснить качественный характер их влияния на самовоспламенение и горение. Для этого целесообразно использовать минимальные начальные концентрации примесей, при которых это влияние уже заметно. Их значения определялись в процессе моделирования при температуре и давлении, указанных выше. В итоге были приняты следующие начальные концентрации: 10 ррт для атомов О и Н, 20 ррт для радикалов ОН, 200 ррт для радикалов HO<sub>2</sub>, 100 ppm для молекулы H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и 500 ppm для молекулы H<sub>2</sub>O. Рассматривались бедные (14% Н<sub>2</sub>) и ультрабедные смеси (6% Н<sub>2</sub>) водорода в воздухе.

# РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

#### Влияние примеси атомов Н и О

На рис. 1 представлено сравнение задержек воспламенения смесей с содержанием Н<sub>2</sub> в воздухе, составляющим 6% и 14%, в отсутствие и при наличии 10 ppm атомов Н при  $P_0 = 1$  и 6 атм. Задержка воспламенения τ определялась как время достижения максимума выхода электронно-возбужденных радикалов ОН\*. Такой подход был обоснован в работе [42]. Рисунок 1 показывает, что значения τ для обоих значений концентрации H<sub>2</sub> в воздухе различаются незначительно, сокращаясь с ростом доли водорода в смеси. При  $P_0 = 1$  атм добавка 10 ррт Н приводит к заметному уменьшению значения т в области 870 < T < 1000 К. При T > 1000 К и T < 870 К влияние примеси атомов Н значительно ослабевает. При Т~900 К наблюдается наиболее резкое уменьшение значения т для обеих смесей, составляющее более двух порядков величины. При  $P_0 = = 6$  атм добавление атомов H влияет на величину τ при 1000 < *T* < 1370 К. Этот эффект значительно слабее, чем при  $P_0 = 1$  атм, и достигает максимума при  $T \sim 1140$  K, когда значение  $\tau$ сокращается приблизительно в 6 раз.

На рис. 2 представлено сравнение задержек воспламенения смесей водорода с воздухом, содержащих 6% и 14%  $H_2$ , в отсутствие и при наличии 10 ppm О при  $P_0 = 1$  атм. Характер влияния примеси атомов О повторяет таковой для атомов H (рис. 1). Подобное совпадение влияния атомов O и H наблюдается и при расчетах с начальным давлением в 6 атм, которое повторяет зависимости, представленные на рис. 1.

# Влияние примесей радикалов ОН и HO<sub>2</sub>

На рис. 3 представлены температурные зависимости  $\tau$  для смесей водорода с воздухом при содержании в них 6% и 14% H<sub>2</sub> в отсутствие радикала ОН и при его наличии в количестве 20 ppm. Сравнивая рис. 1–3, можно видеть, что влияние примеси ОН аналогично влиянию добавок О и H с единственным различием, заключающимся в том, что при  $P_0 = 1$  атм наблюдается слабое влияние примеси ОН при T > 1000 К. При T < 850 К влияние добавок ОН на значение  $\tau$  фактически не обнаруживается. В целом область максимального влияния радикала ОН вблизи  $T \sim 900$  К несколько шире, чем в случае примесей О и Н. При давлении  $P_0 = 6$  атм влияние примеси ОН в количестве 20 ppm сравнимо с влиянием 10 ppm O или H.

В отличие от влияния радикала OH на задержку воспламенения, добавление радикала  $HO_2$  начинает сказываться при концентрациях последнего на порядок выше. На рис. 4 представлены результаты численного моделирования влияния



**Рис. 1.** Температурная зависимость времени задержки воспламенения т смесей водорода с воздухом при содержании 6% (линии 1, 3, 5, 7) и 14% (линии 2, 4, 6, 8)  $H_2$  в них при  $P_0 = 1$  атм (линии 1–4) и  $P_0 = 6$  атм (линии 5–8). Примесь H в количестве 10 ppm – линии 3, 4, 7, 8.



**Рис. 2.** Температурная зависимость времени задержки воспламенения  $\tau$  смесей водорода с воздухом при содержании 6% (линии 1, 3) и 14% (линии 2, 4) H<sub>2</sub> в них и  $P_0 = 1$  атм. Примесь О в количестве10 ppm — линии 3 и 4.



**Рис. 3.** Температурная зависимость времени задержки воспламенения т смесей водорода с воздухом при содержании 6% (линии 1, 3, 5, 7) и 14% (линии 2, 4, 6, 8)  $H_2$  в них при  $P_0 = 1$  атм (линии 1–4) и  $P_0 = 6$  атм (линии 5–8). Примесь радикала OH в количестве 20 ppm – линии 3, 4, 7, 8.

примеси HO<sub>2</sub> в количестве 200 ppm на величину т для обеих смесей. Влияние HO<sub>2</sub> при  $P_0 = 1$  атм заметно при T < 1000 K вплоть до границы исследуемого в работе температурного интервала. Наибольшее влияние примеси HO<sub>2</sub> наблюдается, как и в случае атомов O, H и радикала OH, вблизи  $T \sim$ ~ 900 K. При давлении  $P_0 = 6$  атм значение  $\tau$  сокращается при всех T < 1300 K. Влияние добавки HO<sub>2</sub> максимально в области  $T \sim 1100$  K.

# Влияние примесей H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O

На рис. 5 представлено сравнение значений задержки воспламенения смесей водорода с воздухом при содержании в них 6% и 14% H<sub>2</sub> в отсутствие и при наличии 100 ppm  $H_2O_2$  при  $P_0 = 1$  и 6 атм. Видно, что примесь  $H_2O_2$  при  $P_0 = 1$  атм наиболее резко понижает значение  $\tau$  при 870 < T < < 930 К для обеих смесей. При  $P_0 = 6$  атм влияние примеси  $H_2O_2$  максимально при 1000 < T < 1250 K. При росте температуры выше, чем в указанных интервалах, оно ослабевает и постепенно становится незначительным. С понижением температуры, при T < 870 К ( $P_0 = 1$  атм) и T < 1000 К ( $P_0 =$ = 6 атм), степень влияния примеси H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, аналогично случаю с HO<sub>2</sub>, снижается до устойчивой существенной величины, в отличие от влияния примесей О, Н и ОН (рис. 1-4).

Заметного влияния присутствия воды в количестве до 1% от общего состава смеси посредством численного моделирования при  $P_0 = 1$  и 6 атм не обнаружено ни для одного содержания (6% и 14%)  $H_2$  в воздухе.

#### АНАЛИЗ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ВЕДУЩИХ РЕАКЦИЙ

Для выяснения механизма рассматриваемого влияния проведен анализ чувствительности ведущих реакций в отсутствие примесей. В периоде индукции, определяющем значение τ, цепной процесс протекает в квазистационарном режиме [43]. Поэтому анализ чувствительности S важнейших реакций выполнен только для одного носителя цепи. Поскольку влияние примесей слабо зависит от содержания водорода, рассматривалась только 6%-ная смесь водорода с воздухом. Из рис. 1–5 следует, что влияние всех примесей максимально при  $T \sim 900$  К для  $P_0 = 1$  атм и при  $T \sim 1100$  К для  $P_0 = 6$  атм. На рис. 6 представлен анализ чувствительности для этих условий. Видно, что при  $P_0 = 1$  атм помимо реакций, определяющих кроссовер [38]:

$$H + O_2 = O + OH, \tag{1}$$

$$H + O_2 + M = HO_2 + M,$$
 (2)



**Рис. 4.** Температурная зависимость времени задержки воспламенения т смесей водорода с воздухом при содержании 6% (линии 1, 3, 5, 7) и 14% (линии 2, 4, 6, 8)  $H_2$  в них при  $P_0 = 1$  атм (линии 1–4) и  $P_0 = 6$  атм (линии 5–8). Примесь радикала  $HO_2$  в количестве 200 ppm – линии 3, 4, 7, 8.



**Рис. 5.** Температурная зависимость времени задержки воспламенения т смесей водорода с воздухом при содержании 6% (линии 1, 3, 5, 7) и 14% (линии 2, 4, 6, 8)  $H_2$  в них при  $P_0 = 1$  атм (линии 1–4) и  $P_0 = 6$  атм (линии 5–8). Примесь молекулы  $H_2O_2$  в количестве 100 ppm – линии 3, 4, 7, 8.



**Рис. 6.** Анализ чувствительности реакций по атому H,  $S_{\rm H}$ , для смеси 6% H<sub>2</sub> с воздухом при  $T_0 = 900$  K,  $P_0 = 1$  атм (*a*) и  $T_0 = 1100$  K,  $P_0 = 6$  атм (*b*).

определенное влияние оказывает реакция

$$OH + OH + M = H_2O_2 + M.$$
 (3)

При  $P_0 = 6$  атм влияние реакции (3) не обнаруживается. В реакциях (1)–(3) участвуют все атомы, радикалы и молекулы, играющие важную роль в кинетике самовоспламенения. Вода же здесь отсутствует, чем и объясняется нулевая чувствительность реакций к ней.

Проведенный анализ чувствительности для  $H_2O_2$ ,  $S_{H_2O_2}$ , при T = 800 К и  $P_0 = 1$  атм представлен на рис. 7. Видно, что помимо реакций (1)–(3) ощущается вклад реакций

$$H_2 + O_2 = OH + OH,$$
  
 $H_2O_2 + H = HO_2 + H_2,$ 

которые увеличивают выход перекиси водорода, что приводит к большему вкладу  $H_2O_2$  в снижение значения  $\tau$ .

В заключение следует отметить, что в работе [44] посредством численного моделирования была предпринята попытка оценить влияние примесей H, O, OH и H<sub>2</sub>O в количестве нескольких ppm на процесс самовоспламенения смеси H<sub>2</sub>–O<sub>2</sub> при температурах 1450 < T < 3370 K, но никакого эффекта обнаружено не было. Рисунки 1–5 показывают, что влияние примесей H, O, OH, HO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> проявляется при температурах ниже указанных в [44], причем по характеру этого влияния рассмотренные атомы, радикалы и молекулы можно разделить на две группы. Первая – это атомы O, H и радикал OH. Вторая – HO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Влияния воды как примеси в количестве до 1% от общего состава смеси, как и в работе [44], не обнаружено.



**Рис. 7.** Анализ чувствительности реакций по выходу молекулы  $H_2O_2$ ,  $S_{H_2O_2}$ , для смеси 6%  $H_2$  с воздухом при  $T_0 = 800$  К и  $P_0 = 1$  атм.

#### выводы

Проведенное с использованием ДКМ численное моделирование самовоспламенения бедных и ультрабедных водородно-воздушных смесей показывает, что добавление к ним примесей H, O, OH, HO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> сокращает задержку воспламенения. Описаны общие тенденции влияния последних на величину  $\tau$ . Влияние присутствия воды в количестве до 1% от общего состава смеси не обнаружено. Сделаны следующие выводы.

1. Примеси H, O, OH, HO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> оказывают наибольшее влияние вблизи температур  $T \sim 900$  К при  $P_0 = 1$  и  $T \sim 1100$  К при  $P_0 = 6$  атм.

2. Анализ выявил высокую чувствительность ведущих реакций к примесям H, O, OH и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Влияние гидропероксильного радикала обнаруживается только при многократном увеличении его концентрации по сравнению с другими примесями.

3. Степень сокращения задержки воспламенения убывает для всех примесей по мере приближения к концам исследованного интервала температур.

4. При высоких температурах заметно только влияние ОН.

5. Влияние примесей HO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> остается заметным и при относительно низких температурах.

6. Рассмотренные примеси по характеру их влияния на самовоспламенение можно разделить на две группы: первая — это H, O и OH, вторая — HO<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>.

Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФИЦ ХФ РАН на выполнение госзадания № 122040500073-4.

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Rogers R.C., Schexnayder C.J. Jr. NASA: Paper 1856. Hampton, VA, 1981.
- 2. Аветисян А.А. Азатян В.В. Калачев В.И. и др. // Кинетика и катализ. 2007. Т. 48. № 1. С. 12.
- Заманский В.М., Борисов А.А. // Итоги науки и техники. Сер. "Кинетика и катализ". М.: ВИНИТИ, 1989. С. 160.
- Drakon A., Eremin A. // Combust. Sci. Tech. 2018.
  V. 190. № 3. P. 550.
- 5. Азатян В.В., Ведешкин Г.К., Филатов Ю.М. // Вестн. РАН. 2019. Т. 89. № 3. С. 279.
- Schonborn A., Sayad P., Konnov A.A., Klingmann J. // Intern. J. Hydrogen Energy. 2014. V. 39. № 23. P. 12166.
- Dryer F.L., Chaos M. // Combust. and Flame. 2008. V. 152. P. 293.
- Chaos M., Dryer F.L. // Combust. Sci. Tech. 2008. V. 180. № 6. P. 1053.
- 9. *Павлов В.А., Герасимов Г.Я. //* Инж.-физ. журн. 2014. Т. 87. № 6. С. 1238.

- 10. Urzay J., Kseib N., Davidson D.F., Iaccarino G., Hanson R.K. // Combust. and Flame. 2014. V. 161. № 1. P. 1
- 11. Власов П.А., Смирнов В.Н., Тереза А.М. // Хим. физика. 2016. Т. 35. № 6. С. 35.
- 12. *Смыгалина А.Е., Киверин А.Д. //* Хим. физика. 2021. Т. 40. № 8. С. 49.
- 13. Гельфанд Б.Е., Медведев С.П., Хомик С.В. и др. // ДАН. 1996. Т. 349. № 4. С. 482.
- Gelfand B.E., Popov O.E., Medvedev S.P. et al. // Proc. 21st Sympos. (Intern.) on Shock Waves / Ed. Houwing A.F.P. Brisbane, Canberra, Australia: Queensland University, 1997. Paper № 2400.
- 15. Забайкин В.А., Perkov E.V., Tret'yakov P.K. // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33. № 3. С. 70.
- 16. Козлов С.Н., Александров Е.Н., Кузнецов Н.М., Маркевич Е.А. // Хим. физика. 2013. Т. 32. № 11. С. 75.
- 17. Александров Е.Н., Маркевич Е.А., Козлов С.Н., Частухин Д.С., Кузнецов Н.М. // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49. № 1. С. 3.
- 18. Маркевич Е.А., Козлов С.Н., Александров Е.Н., Кузнецов Н.М. // Хим. физика. 2014. Т. 33. № 6. С. 47.
- 19. *Rubtsov N.M.* Key Factors of Combustion. From Kinetics to Gas Dynamics. Cham, Switzerland: Springer, 2017.
- Tingas E.Al., Kyritsis D.C., Goussis D.A. // J. Energy Eng. 2019. V. 145. Issue 1. P. 04018074
- Налбандян А.Б., Воеводский В.В. Механизм окисления и горения водорода. М.: Изд-во АН СССР, 1949.
- 22. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974.
- 23. Crane J., Shi X., Singh A.V., Tao Y., Wang H. // Combust. and Flame. 2019. V. 200. P. 44.
- 24. *Hu E., Pan L., Gao Z. et al.* // Inter. J. Hydr. Energ. 2016. V. 41. P. 13261.
- 25. Keromnes A., Metcalfe W.K., Heufer K.A. et al. // Combust. Flame. 2013. V. 160. P. 995.
- Mulvihill C.R., Petersen E.L. // Proc. Combust. Inst. 2019. V. 37. Issue 1. P. 259; https://doi.org/10.1016/j.proci.2018.05.024
- 27. Cantwell B.J. // Annu. Rev. Fluid Mech. 1981. V. 13. P. 457.
- Репик Е.У., Соседко Ю.П. Турбулентный пограничный слой. М.: Физматлит, 2007.
- 29. Физическая химия быстрых реакций / Под ред. Левитт Б.П. М.: Мир, 1976.
- 30. Safety standard for hydrogen and hydrogen systems NASA. Washington, DC, 1997. Paper NSS 1740.16.
- 31. *Sinev M.Yu.* // Rus. J. Phys. Chem. B. 2007. V. 1. № 4. P. 329.
- 32. Долин П.И., Эрилер Б.В. // Доклады, представленные СССР на Междунар. конф. по мирному использованию атомной энергии в Женеве. М.: АН СССР, 1955. С. 293.
- 33. Le Caer S. // Water. 2011. V. 3. № 1. P. 235; https://doi.org/10.3390/w3010235
- Macdonald D.D., Engelhardt G.R., Petrov A.A // Corros. Mater. Degrad. 2022. V. 3. P. 470; https://doi.org/10.3390/cmd3030028

- 35. CHEMKIN-Pro 15112. CK-TUT-10112-1112-UG-1. Reaction Design: San Diego, 2011.
- Grune J., Sempert K., Haberstroh H., Kuznetsov M., Jordan T. // J. Loss Prevention Process Industries. 2013. V. 26. P. 317.
- Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К. и др. // Хим. физика. 2022. Т. 41. № 8. С. 66.
- Sanchez A.L., Williams F.A. // Progr. Energy Combust. Sci. 2014. V. 41. P. 1.
- Голодец Г.И. Гетерогенно-каталитические реакции с участием молекулярного кислорода. Киев: Наук. думка, 1977.
- 40. *Синев М.Ю*. Автореф. дис. ... д-ра хим. наук. М.: ИХФ РАН, 2011. С. 63.
- Высокореакционные интермедиаты / Под ред. Егорова М.П., Мельникова М.Я. М.: КРАСАНД, 2014.
- 42. *Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К. и др. //* Горение и взрыв. 2021.Т. 14. № 4. С. 4
- 43. *Азатян В.В.* // Кинетика и катализ. 2020. Т. 61. № 3. С. 291.
- 44. *Masten D.A., Hanson R.K., Bowman C.T.* // J. Phys. Chem. 1990. V. 94. № 18. P. 7119.