

## ГЛУБОКОУВАЖАЕМЫЙ КОЛЛЕГА!

Очередное **269** заседание семинара ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА В ГАЗОВОЙ ДИНАМИКЕ состоится в четверг, **5 октября 2017 года (11 часов, кинозал Института Механики МГУ)**

В программе:

**О.В. Скребков, А.Л. Смирнов** (*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*). Образование электронно возбужденного радикала  $\text{OH}^*(A)$  в реакции водорода с кислородом за ударной волной в неравновесных условиях.

Наш почтовый адрес: 119192, Москва, Мичуринский проспект, 1, Институт Механики МГУ  
Наш электронный адрес: chemphys@imec.msu.ru  
Наш телефон: (495) 939-2598

### Тезисы доклада

Механизм образования электронно возбужденного радикала  $\text{OH}^*(A^2\Sigma^+)$  исследуется путем анализа результатов расчетов, количественно описывающих ударно-волновые эксперименты по определению момента максимального излучения  $\text{OH}^*$  при температурах  $T < 1500$  К и давлениях  $p \leq 2$  атм, когда колебательная неравновесность является фактором, определяющим механизм и скорость процесса в целом. Эти расчеты выполнялись путем моделирования процесса окисления водорода с учетом колебательной неравновесности исходных компонентов,  $\text{H}_2$  и  $\text{O}_2$ , интермедиатов,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{OH}(X^2\Pi)$ ,  $\text{O}_2^*(^1\Delta)$ , и продукта реакции  $\text{H}_2\text{O}$ . Анализ показал, что в этих условиях важными (по относительному вкладу в суммарный процесс образования  $\text{OH}^*$ ) являются реакции  $\text{OH}(v) + \text{Ar} \rightarrow \text{OH}^* + \text{Ar}$ ,  $\text{O}^*(^1D) + \text{H}_2(v) \rightarrow \text{OH}^* + \text{H}$ ,  $\text{O} + \text{HO}_2(v) \rightarrow \text{OH}^* + \text{O}_2$  и (на начальной стадии процесса) реакция  $\text{H}_2 + \text{HO}_2(v) \rightarrow \text{OH}^* + \text{H}_2\text{O}$ , протекающие в колебательно неравновесном режиме, когда активационный барьер преодолевается в результате зависимости констант скорости от степени колебательного возбуждения реагентов; а также бимолекулярные реакции  $\text{O}_3 + \text{H} \rightarrow \text{OH}^* + \text{O}_2$ ,  $\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{OH}^* + \text{H}_2\text{O}$  (на стадии интенсивной реакции при формировании максимума излучения) как реакции обратные процессам химического тушения.