

О КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМАХ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ИЗООКТАНА В СМЕСИ С ВОЗДУХОМ

Н. А. Славинская, А. М. Старик

Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова, 111116 Москва
star@ciam.ru

Разработана кинетическая схема для описания самовоспламенения изооктана в воздухе, насчитывающая 976 реакций с участием 126 компонентов и удовлетворительно описывающая особенности процесса как при низких, так и при высоких начальных температурах смеси. Результаты численного моделирования с погрешностью не хуже 30 % согласуются с экспериментальными данными по пиролизу изооктана и по времени задержки самовоспламенения смеси изооктан + воздух в интервалах начальных значений давления $0,1 \div 4,5$ МПа и температуры $700 \div 1300$ К при коэффициенте избытка топлива $0,5 \div 2,0$.

Ключевые слова: смесь изооктан — воздух, кинетическая схема, самовоспламенение.

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию особенностей воспламенения и горения тяжелых углеводородных топлив C_nH_{2n+2} ($n \geq 4$) посвящено значительное число работ [1–10]. Интерес к этой проблеме обусловлен необходимостью решения целого комплекса задач, связанных с анализом процессов в камерах сгорания энергетических установок, авиационных и ракетных двигателей, использующих жидкое углеводородное топливо. Особое место среди этих топлив занимают n -гептан и изооктан (2,4,4-триметилпентан), которые входят в состав бензина, используемого в двигателях внутреннего сгорания; изооктан содержится также в авиационном керосине.

В последнее время достигнут значительный прогресс в понимании кинетических механизмов воспламенения этих углеводородов. Разработаны детальные кинетические схемы, позволяющие описать процессы воспламенения и горения n -гептана как при низких, так и при высоких температурах, в широком диапазоне изменения давления и состава смеси $n-C_7H_{16} + O_2$ [8, 11–15]. При этом лучшее соответствие экспериментальным данным удается достичь только при значительной детализации процесса окисления. Понятно, что такие кинетические схемы должны включать все элементарные стадии, характерные для окисления низших углеводородов. Так, предложенная

в [8] схема состоит из 519 реакций с участием 72 компонентов и описывает процесс окисления гептана в воздухе при атмосферном давлении, начальных температурах $T_0 = 950 \div 1200$ К и коэффициенте избытка топлива $\varphi = 0,2 \div 2,0$. Погрешность описания экспериментальных данных в среднем составляет 50 %, но при этом максимальные отклонения достигают 300 %. Существенно лучшего соответствия эксперименту (≈ 30 %) по измерению времени задержки воспламенения τ_{ind} в диапазоне $p_0 = 0,1 \div 4,2$ МПа, $T_0 = 550 \div 1700$ К, $\varphi = 0,3 \div 1,5$ удалось добиться авторам работы [15], представившим кинетическую схему, включающую 2450 элементарных реакций, в которых участвуют 550 компонентов.

Работ, посвященных исследованию механизмов воспламенения октана, значительно меньше. Один из первых детальных механизмов окисления изо- и n -октанов был предложен в [5]. Он насчитывает около 350 реакций с участием 62 компонентов. Однако диапазоны p_0 , T_0 и φ , в которых удается достичь удовлетворительного описания экспериментальных данных, невелики. Более детальная кинетическая схема окисления изооктана разработана в [16]. Она позволяет удовлетворительно описывать процесс с погрешностью не хуже 40 % для интервалов $T_0 = 550 \div 1500$ К, $p_0 = 0,1 \div 4$ МПа, $\varphi = 0,5 \div 2,0$ и состоит из 1303 реакций и 324 компонентов. На основе этой схемы предложен редуцированный полуэмпирический механизм воспламенения *изо*- C_8H_{18} в смеси с O_2 . Сокращение кинетического механизма проведено та-

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (номер проекта 02-02-81016), INTAS (номер проекта 00-0460) и CRDF (номер проекта RC1-2327).

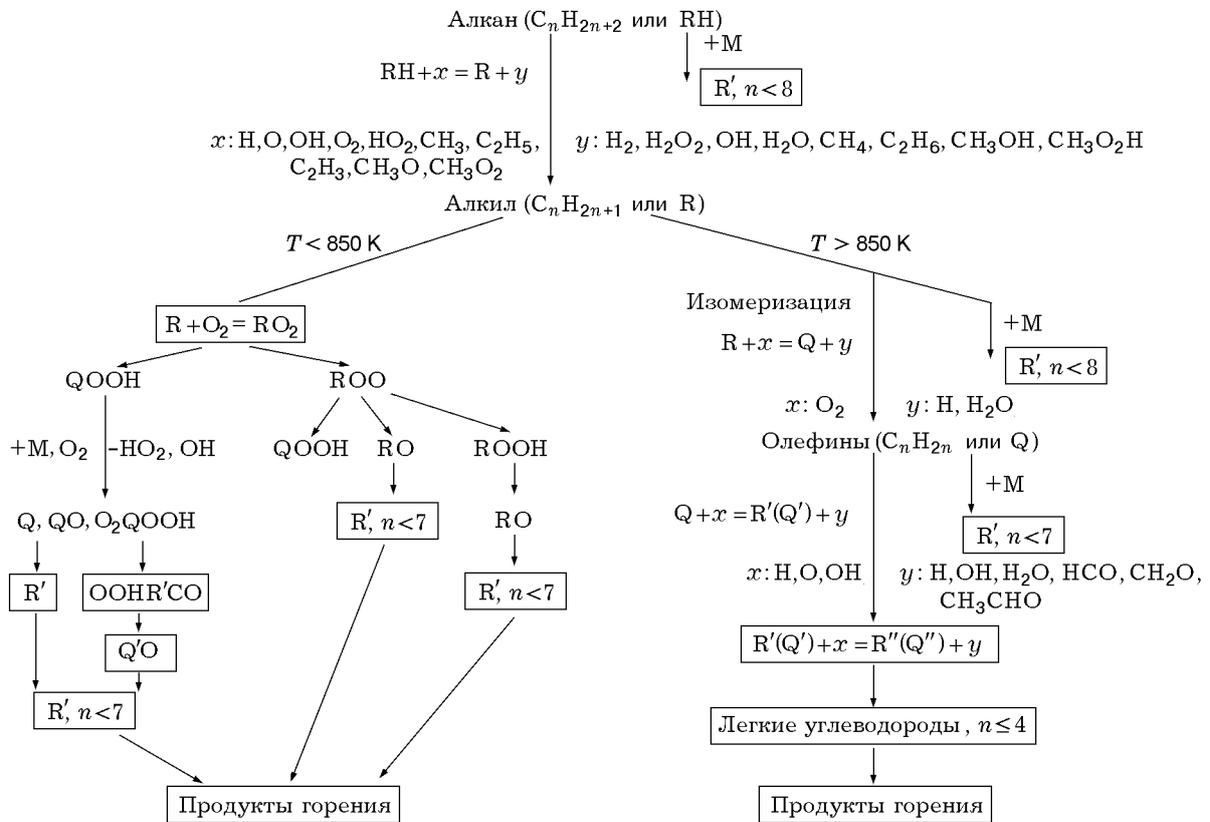


Рис. 1. Принципиальная схема реакционного механизма воспламенения изооктана

ким образом, что в результате в нем учтены только промежуточные радикалы, участвующие в брутто-реакциях.

Попытка создания редуцированного механизма самовоспламенения смесей *изо*-C₈H₁₈ + *n*-C₇H₁₆ + воздух была предпринята в [9]. Однако несмотря на то, что предложенная модель качественно правильно описывает характер изменения τ_{ind} в зависимости от p_0 , T_0 , φ , количественного соответствия достигнуто не было. Связано это с тем, что в качестве исходной была принята слишком простая кинетическая схема, не описывающая деталей процесса.

В [16] рассмотрен алгоритм сокращения детального кинетического механизма горения алканов. Предложенные редуцированные кинетические схемы самовоспламенения *n*-гептана содержат 1451 реакцию и 186 компонентов, изооктана — 1465 реакций и 216 компонентов. Сравнение с экспериментом проведено для узких интервалов изменения параметров: $T_0 = 923\text{ K}$, $p_0 = 0,1\text{ МПа}$, $\varphi = 6,25$ для изооктана; $T_0 = 600 \div 1100\text{ K}$, $p_0 = 0,1\text{ МПа}$, $\varphi = 1$ для *n*-гептана. Для этих условий рассчитанные

значения τ_{ind} удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

К сожалению, следует констатировать, что полуэмпирические механизмы, содержащие брутто-реакции, не позволяют в принципе добиться соответствующего действительности описания процесса воспламенения тяжелых углеводородов. Редуцированные кинетические схемы, опубликованные в последнее время [16], являются все же слишком большими для практического использования. Поэтому остается открытым вопрос о создании кинетической модели, которая описывала бы все основные элементарные стадии окисления октана как при низких, так и при высоких значениях T_0 в широких диапазонах изменения p_0 и насчитывала бы при этом разумное число компонентов.

Целью данной работы как раз и является создание такой модели и анализ механизмов воспламенения смеси *изо*-C₈H₁₈ + воздух при низких (600 ÷ 850 K) и при высоких (> 850 K) температурах газа.

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Любая кинетическая схема, разрабатываемая для описания горения тяжелых углеводородных топлив, должна включать в себя кинетические механизмы окисления более легких углеводородов. Поэтому при создании детальной неэмпирической модели, описывающей самовоспламенение смесей *изо*-C₈H₁₈ + воздух, в качестве базовой была выбрана схема, содержащая 562 обратимые реакции с участием 83 компонентов, разработанная в [17] для анализа особенностей горения продуктов деструкции C₃H₈ и C₄H₁₀. Эта схема позволяет получить хорошее соответствие экспериментальным данным (расхождение составляет не более 25 %) по зависимости $\tau_{ind}(T_0)$ для смесей C_{2n}H_{2n+2}+O₂+Ar ($n = 1 \div 4$) и H₂+воздух в достаточно широком диапазоне $T_0 = 1000 \div 1500$ К. Данный механизм был дополнен 478 обратимыми реакциями с участием 43 компонентов. Реакции, не включенные в схему [17], приведены в табл. 1. Там же даны коэффициенты для вычисления констант скоростей прямых (k_q^+) и обратных (k_q^-) реакций по формуле $k_q = A_q T^{n_q} \exp(-E_{a,q}/T)$, выбранные на основе рекомендаций [2–6, 8, 11, 13–15, 18–22]. В случае отсутствия данных о величине констант k_q^- их значения вычислялись через константу равновесия K_{eq} . При вычислении K_{eq} изменения энтальпии $\Delta H(T) = H(T) - H(0)$ и приведенной энергии Гиббса $\Delta \Phi_q^0(T)$ в q -й реакции были взяты из [23]. Для веществ, свойства которых не описаны в доступной литературе, энтальпии образования и энергии диссоциации рассчитывались по методу групповых вкладов [24, 25].

Остановимся кратко на описании предлагаемой модели. При построении кинетических моделей воспламенения тяжелых углеводородов выделяют низкотемпературный ($T_0 = 550 \div 850$ К) и высокотемпературный ($T_0 > 850$ К) режимы [12, 14]. Низкотемпературный режим характеризуется доминирующим влиянием на начальный этап процесса прямых реакций окисления исходного углеводорода (в данном случае *изо*-C₈H₁₈) и его производных (C₈H₁₇), а высокотемпературный — доминирующим влиянием реакций разложения C_nH_{2n+2} и C_nH_{2n+1}. Поэтому полный реакционный механизм, описывающий процесс воспламенения в широком диапазоне начальных температур ($T_0 = 550 \div 1400$ К),

должен содержать реакции, характерные как для низко-, так и для высокотемпературной области. Рис. 1, на котором показана последовательность процессов, определяющих воспламенение алканов, иллюстрирует структуру модели. Она обобщает данные работ [2, 12, 14–16] и включает в себя практически все этапы окисления газообразных углеводородов. Здесь и далее используются следующие обозначения: RH=C₂H_{2n+2}, R=C_nH_{2n+1}, Q=C_nH_{2n}, ROO=C_nH_{2n+1}OO, QOOH=C_nH_{2n}OOH, OOOOH=OOC_nH_{2n}OOH. Ниже приведено описание основных классов реакций, включенных в модель.

1. *Мономолекулярный распад алканов* RH = R' + R'', RH = R + H. Благодаря высокой энергии активации (≈ 325 кДж/моль) роль этих реакций наиболее значительна при высоких начальных температурах. Они ведут к образованию алкильных радикалов с разным числом атомов углерода и атомов водорода, вступающих в реакцию разветвления цепи H + O₂ = O + OH. Реакции распада с образованием метильных радикалов CH₃ оказывают меньшее влияние на ускорение процесса вследствие относительно высокой скорости рекомбинации радикалов CH₃: CH₃ + CH₃ = C₂H₆.

2. *Отщепление атомов водорода в исходном топливе*: RH + x = R + y. Эти реакции ведут к образованию алкильных радикалов R исходного топлива, которые играют важную роль в развитии цепного механизма горения. Начальной реакцией отщепления H является реакция взаимодействия топлива с кислородом: *изо*-C₈H₁₈ + O₂ = *k*-C₈H₁₇ + HO₂. Однако ее вклад в образование алкильных радикалов мал из-за высокой энергии активации. Отщепление атомов водорода идет в основном при взаимодействии алканов с H, O, OH, HO₂, образующихся в последующих стадиях. При этом наибольший вклад в области $T_0 = 850 \div 1000$ К вносят реакции с OH, имеющие низкие энергии активации. Скорости отщепления атомов водорода от алкана зависят от местоположения атома H в молекуле. Мы учитывали этот факт только для октильных радикалов, существенно влияющих на процесс окисления *изо*октана. При этом число изомеров было сокращено до четырех, что позволило уменьшить число компонентов без увеличения погрешности описания. Константы скоростей этих реакций принимают в литературе равными константам аналогичных реакций для R₁–R₄ в расчете на

Таблица 1

Реакции с участием C₄–C₈-содержащих компонентов,
включенных дополнительно в кинетическую модель

№ п/п	Реакция	k_q^+			k_q^-			Ис- точ- ник
		A_q	n_q	$E_{a,q}$	A_q	n_q	$E_{a,q}$	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
Реакции с C ₈ H _y								
1	$iC_8H_{18} = iC_4H_9 + iC_4H_9$	$6,00 \cdot 10^{16}$	0	$3,90 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	[5]
2	$iC_8H_{18} = iC_5H_{11} + iC_3H_7$	$5,00 \cdot 10^{16}$	0	$3,90 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	[5]
3	$iC_8H_{18} = iC_7H_{15} + CH_3$	$1,20 \cdot 10^{15}$	0	$4,30 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
4	$iC_8H_{18} = 3C_8H_{17} + H$	$5,00 \cdot 10^{16}$	0	$3,90 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	[5]
5	$iC_8H_{18} = 4C_8H_{17} + H$	$5,00 \cdot 10^{16}$	0	$3,90 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	[5]
6	$iC_8H_{18} + H = 1C_8H_{17} + H_2$	$1,00 \cdot 10^8$	2	$3,85 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
7	$iC_8H_{18} + H = 2C_8H_{17} + H_2$	$1,00 \cdot 10^7$	2	$2,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
8	$iC_8H_{18} + H = 3C_8H_{17} + H_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$3,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
9	$iC_8H_{18} + H = 4C_8H_{17} + H_2$	$1,00 \cdot 10^8$	2	$3,85 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
10	$iC_8H_{18} + O = 1C_8H_{17} + OH$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$3,92 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
11	$iC_8H_{18} + O = 2C_8H_{17} + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
12	$iC_8H_{18} + O = 3C_8H_{17} + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,64 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
13	$iC_8H_{18} + O = 4C_8H_{17} + OH$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$3,92 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
14	$iC_8H_{18} + OH = 1C_8H_{17} + H_2O$	$3,00 \cdot 10^8$	1,05	$9,20 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
15	$iC_8H_{18} + OH = 4C_8H_{17} + H_2O$	$3,00 \cdot 10^8$	1,05	$9,20 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
16	$iC_8H_{18} + OH = 2C_8H_{17} + H_2O$	$3,00 \cdot 10^7$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
17	$iC_8H_{18} + OH = 3C_8H_{17} + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$2,20 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
18	$iC_8H_{18} + O_2 = 1C_8H_{17} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,45 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
19	$iC_8H_{18} + O_2 = 2C_8H_{17} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,40 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
20	$iC_8H_{18} + O_2 = 3C_8H_{17} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$2,30 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
21	$iC_8H_{18} + O_2 = 4C_8H_{17} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,44 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
22	$iC_8H_{18} + HO_2 = 1C_8H_{17} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$9,70 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
23	$iC_8H_{18} + HO_2 = 2C_8H_{17} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
24	$iC_8H_{18} + HO_2 = 3C_8H_{17} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$7,10 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
25	$iC_8H_{18} + HO_2 = 4C_8H_{17} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$9,70 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
26	$iC_8H_{18} + CH_3 = 1C_8H_{17} + CH_4$	$4,00 \cdot 10^{13}$	0	$5,80 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
27	$iC_8H_{18} + CH_3 = 2C_8H_{17} + CH_4$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,70 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
28	$iC_8H_{18} + CH_3 = 3C_8H_{17} + CH_4$	$4,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,80 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
29	$iC_8H_{18} + CH_3 = 4C_8H_{17} + CH_4$	$4,00 \cdot 10^{13}$	0	$5,80 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
30	$iC_8H_{18} + CH_3O = 1C_8H_{17} + CH_3OH$	$5,30 \cdot 10^{10}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
31	$iC_8H_{18} + CH_3O = 2C_8H_{17} + CH_3OH$	$5,50 \cdot 10^{11}$	0	$2,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
32	$iC_8H_{18} + CH_3O = 3C_8H_{17} + CH_3OH$	$1,90 \cdot 10^{10}$	0	$1,40 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
33	$iC_8H_{18} + CH_3O = 4C_8H_{17} + CH_3OH$	$1,90 \cdot 10^{10}$	0	$1,40 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
34	$iC_8H_{18} + C_2H_5 = 1C_8H_{17} + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
35	$iC_8H_{18} + C_2H_5 = 2C_8H_{17} + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
36	$iC_8H_{18} + C_2H_5 = 3C_8H_{17} + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
37	$iC_8H_{18} + C_2H_5 = 4C_8H_{17} + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
38	$1C_8H_{17} = 1C_7H_{14} + CH_3$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$1,30 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
39	$1C_8H_{17} = iC_4H_8 + iC_4H_9$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,00 \cdot 10^3$	[5]
40	$2C_8H_{17} = 3C_7H_{14} + CH_3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,30 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
41	$3C_8H_{17} = iC_4H_8 + tC_4H_9$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,45 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
42	$4C_8H_{17} = 1C_7H_{14} + CH_3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,64 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
43	$4C_8H_{17} = C_3H_6 + iC_5H_{11}$	$6,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,45 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
44	$1C_8H_{17} = C_3H_6 + iC_5H_{11}$	$6,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,45 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
45	$2C_8H_{17} = C_3H_6 + iC_5H_{11}$	$6,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,45 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
46	$3C_8H_{17} = C_3H_6 + iC_5H_{11}$	$6,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,45 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	[5]
47	$1C_8H_{17} = 1C_6H_{12} + C_2H_5$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
48	$2C_8H_{17} = 1C_6H_{12} + C_2H_5$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
49	$3C_8H_{17} = 1C_6H_{12} + C_2H_5$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
50	$4C_8H_{17} = 1C_6H_{12} + C_2H_5$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
51	$1C_8H_{17} = iC_6H_{13} + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
52	$2C_8H_{17} = iC_6H_{13} + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
53	$3C_8H_{17} = iC_6H_{13} + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
54	$4C_8H_{17} = iC_6H_{13} + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
55	$1C_8H_{17} = C_5H_{10} + iC_3H_7$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,38 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
56	$2C_8H_{17} = C_5H_{10} + iC_3H_7$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,38 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
57	$3C_8H_{17} = C_5H_{10} + iC_3H_7$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,38 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
58	$4C_8H_{17} = C_5H_{10} + iC_3H_7$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,38 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
59	$1C_8H_{17} + M = 3C_8H_{17} + M$	$2,11 \cdot 10^{15}$	0	$8,10 \cdot 10^3$	$2,20 \cdot 10^{16}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	[5]
60	$1C_8H_{17} + M = 4C_8H_{17} + M$	$2,02 \cdot 10^{16}$	0	$7,10 \cdot 10^3$	$2,20 \cdot 10^{16}$	0	$7,10 \cdot 10^3$	[5]
61	$3C_8H_{17} = iC_8H_{16} + H$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,90 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$7,50 \cdot 10^2$	[5]
62	$4C_8H_{17} = iC_8H_{16} + H$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,80 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^9$	0	$6,00 \cdot 10^2$	[5]
63	$1C_8H_{17} + O_2 = iC_8H_{16} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$5,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,00 \cdot 10^4$	[5]
64	$2C_8H_{17} + O_2 = iC_8H_{16} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$5,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,00 \cdot 10^4$	[5]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
65	$3C_8H_{17} + O_2 = iC_8H_{16} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$5,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,00 \cdot 10^4$	[5]
66	$4C_8H_{17} + O_2 = iC_8H_{16} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$5,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,00 \cdot 10^4$	[5]
67	$1C_8H_{17} + O_2 = 1C_8H_{17}O_2$	$2,30 \cdot 10^{11}$	0	0	$2,00 \cdot 10^{15}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	[2]
68	$1C_8H_{17}O_2 + M = aC_8H_{16}OOH + M$	$5,90 \cdot 10^{16}$	0	$1,49 \cdot 10^4$	—	—	—	[14]
69	$1C_8H_{17}O_2 + M = bC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	—	—	—	[14]
70	$1C_8H_{17}O_2 + M = cC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	$2,30 \cdot 10^{14}$	0	$7,01 \cdot 10^3$	[14]
71	$aC_8H_{16}OOH = 1C_7H_{14} + CH_2O + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,13 \cdot 10^4$	0	0	0	[14]
72	$cC_8H_{16}OOH = 1C_7H_{14} + CH_2O + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,13 \cdot 10^4$	0	0	0	[14]
73	$aC_8H_{16}OOH + O_2 = 1OOC_8H_{17}OO$	$2,30 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[14]
74	$bC_8H_{16}OOH = 3C_7H_{14} + CH_2O + OH$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,13 \cdot 10^4$	0	0	0	[14]
75	$bC_8H_{16}OOH + O_2 = 2OOC_8H_{17}OO$	$2,30 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[14]
76	$cC_8H_{16}OOH + O_2 = 3OOC_8H_{17}OO$	$2,30 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[14]
77	$1OOC_8H_{17}OO = CH_2O + OH + 1C_7H_{14}OO$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	0	0	0	[14]
78	$1C_7H_{14}OO = C_4H_8O + C_3H_6O$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	—	—	—	[14]
79	$2OOC_8H_{17}OO = CH_2O + OH + 2C_7H_{14}OO$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	0	0	0	[14]
80	$2C_7H_{14}OO = C_4H_8O + C_3H_6O$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	—	—	—	[14]
81	$3OOC_8H_{17}OO = CH_2O + OH + 3C_7H_{14}OO$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	0	0	0	[14]
82	$3C_7H_{14}OO = C_4H_8O + C_3H_6O$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	—	—	—	[14]
83	$C_4H_8O = CH_2O + C_3H_6$	$4,40 \cdot 10^{15}$	0	$3,00 \cdot 10^4$	$1,04 \cdot 10^{33}$	-6,8	$3,10 \cdot 10^4$	[21]
84	$C_4H_8O + M = iC_3H_7 + HCO + M$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$7,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[21]
85	$2C_8H_{17} + O_2 = 2C_8H_{17}O_2$	$2,30 \cdot 10^{11}$	0	0	$2,00 \cdot 10^{15}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	[2]
86	$2C_8H_{17}O_2 + M = aC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	—	—	—	[14]
87	$2C_8H_{17}O_2 + M = bC_8H_{16}OOH + M$	$5,90 \cdot 10^{15}$	0	$1,11 \cdot 10^4$	$2,30 \cdot 10^{14}$	0	$7,01 \cdot 10^3$	[14]
88	$2C_8H_{17}O_2 + M = cC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	$2,00 \cdot 10^{15}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	[14]
89	$3C_8H_{17} + O_2 = 3C_8H_{17}O_2$	$2,30 \cdot 10^{11}$	0	0	—	—	—	[2]
90	$3C_8H_{17}O_2 + M = aC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	—	—	—	[14]
91	$3C_8H_{17}O_2 + M = bC_8H_{16}OOH + M$	$4,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,06 \cdot 10^4$	$2,30 \cdot 10^{14}$	0	$7,01 \cdot 10^3$	[14]
92	$3C_8H_{17}O_2 + M = cC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	$2,00 \cdot 10^{15}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	[14]
93	$4C_8H_{17} + O_2 = 4C_8H_{17}O_2$	$2,30 \cdot 10^{11}$	0	0	—	—	—	[2]
94	$4C_8H_{17}O_2 + M = aC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	—	—	—	[14]
95	$4C_8H_{17}O_2 + M = bC_8H_{16}OOH + M$	$8,00 \cdot 10^{14}$	0	$9,01 \cdot 10^3$	—	—	—	[14]
96	$4C_8H_{17}O_2 + M = cC_8H_{16}OOH + M$	$3,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,20 \cdot 10^4$	—	—	—	[14]
97	$iC_8H_{16} = tC_4H_9 + iC_4H_7$	$1,00 \cdot 10^{16}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
98	$iC_8H_{16} = C_6H_{11} + C_2H_5$	$1,00 \cdot 10^{16}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]
99	$iC_8H_{16} + H = C_8H_{15} + H_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,85 \cdot 10^3$	—	—	—	Оценка
100	$iC_8H_{16} + O = iC_4H_8 + iC_4H_7 + OH$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
101	$iC_8H_{16} + O = iC_7H_{15} + HCO$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
102	$iC_8H_{16} + O = C_8H_{15} + OH$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,00 \cdot 10^3$	—	—	—	Оценка
103	$iC_8H_{16} + OH = iC_4H_8 + iC_4H_7 +$ $+H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,25	$3,00 \cdot 10^2$	—	—	—	[5]
104	$iC_8H_{16} + OH = iC_7H_{15} + CH_2O$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	[5]
105	$iC_8H_{16} + O_2 = C_8H_{15} + HO_2$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,01 \cdot 10^4$	—	—	—	Оценка
106	$iC_8H_{16} + HO_2 = C_8H_{15} + H_2O_2$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,55 \cdot 10^3$	—	—	—	—/—
107	$iC_8H_{16} + CH_3 = C_8H_{15} + CH_4$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,65 \cdot 10^3$	—	—	—	—/—
108	$iC_8H_{16} + C_2H_5 = C_8H_{15} + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,00 \cdot 10^3$	—	—	—	—/—
109	$C_8H_{15} = iC_4H_7 + iC_4H_8$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,51 \cdot 10^4$	—	—	—	—/—
110	$C_8H_{15} = C_4H_6 + tC_4H_9$	$2,52 \cdot 10^{13}$	0	$1,51 \cdot 10^4$	—	—	—	—/—
Реакции с C_7H_y								
111	$C_7H_{16} = nC_3H_7 + iC_4H_9$	$2,30 \cdot 10^{17}$	0	$4,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
112	$C_7H_{16} = iC_5H_{11} + C_2H_5$	$6,50 \cdot 10^{16}$	0	$4,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
113	$C_7H_{16} = iC_6H_{13} + CH_3$	$4,20 \cdot 10^{16}$	0	$4,30 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
114	$C_7H_{16} = iC_7H_{15} + H$	$2,00 \cdot 10^{18}$	0	$5,00 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
115	$C_7H_{16} + H = iC_7H_{15} + H_2$	$9,60 \cdot 10^6$	2	$2,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
116	$C_7H_{16} + O = iC_7H_{15} + OH$	$2,30 \cdot 10^6$	2,4	$7,85 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
117	$C_7H_{16} + OH = iC_7H_{15} + H_2O$	$5,30 \cdot 10^9$	0,97	$8,00 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
118	$C_7H_{16} + O_2 = iC_7H_{15} + HO_2$	$2,50 \cdot 10^{13}$	0	$2,50 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
119	$C_7H_{16} + CH_3 = iC_7H_{15} + CH_4$	$1,60 \cdot 10^{12}$	0	$5,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
120	$C_7H_{16} + HO_2 = iC_7H_{15} + H_2O_2$	$1,30 \cdot 10^{12}$	0	$9,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
121	$C_7H_{16} + C_2H_5 = iC_7H_{15} + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$6,70 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
122	$C_7H_{16} + C_2H_3 = iC_7H_{15} + C_2H_4$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
123	$C_7H_{16} + C_3H_5 = iC_7H_{15} + C_3H_6$	$4,00 \cdot 10^{11}$	0	$9,80 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
124	$C_7H_{16} + iC_4H_7 = iC_7H_{15} + iC_4H_8$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
125	$C_7H_{16} + CH_3O = iC_7H_{15} +$ $+CH_3OH$	$3,20 \cdot 10^{11}$	0	$3,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
126	$C_7H_{16} = iC_3H_7 + tC_4H_9$	$1,30 \cdot 10^{17}$	0	$4,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
127	$iC_7H_{15} = iC_5H_{11} + C_2H_4$	$2,50 \cdot 10^{13}$	0	$1,44 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$3,30 \cdot 10^3$	[5]
128	$iC_7H_{15} = C_5H_{10} + C_2H_5$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
129	$iC_7H_{15} + O_2 = 1C_7H_{14} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
130	$iC_7H_{15} + O_2 = 3C_7H_{14} + HO_2$	$3,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
131	$iC_7H_{15} = iC_4H_8 + iC_3H_7$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,45 \cdot 10^3$	[5]
132	$iC_7H_{15} = 1C_7H_{14} + H$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,00 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,00 \cdot 10^2$	[5]
133	$iC_7H_{15} = iC_4H_9 + C_3H_6$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,00 \cdot 10^3$	[5]
134	$iC_7H_{15} = 3C_7H_{14} + H$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,00 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,00 \cdot 10^2$	[5]
135	$iC_7H_{15} = 1C_6H_{12} + CH_3$	$5,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,55 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
136	$1C_7H_{14} = C_3H_5 + iC_4H_9$	$3,50 \cdot 10^{16}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]
137	$3C_7H_{14} = C_6H_{11} + CH_3$	$6,00 \cdot 10^{16}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]
138	$1C_7H_{14} = iC_4H_7 + iC_3H_7$	$2,00 \cdot 10^{17}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]
139	$1C_7H_{14} = C_2H_5 + C_5H_9$	$3,60 \cdot 10^{15}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
140	$3C_7H_{14} = C_2H_5 + C_5H_9$	$3,60 \cdot 10^{15}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
141	$1C_7H_{14} + H = iC_7H_{13} + H_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$7,00 \cdot 10^3$	[5]
142	$3C_7H_{14} + H = iC_7H_{13} + H_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$7,00 \cdot 10^3$	[5]
143	$1C_7H_{14} + O = iC_7H_{13} + OH$	$1,00 \cdot 10^6$	2,56	$-5,00 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
144	$3C_7H_{14} + O = iC_7H_{13} + OH$	$1,00 \cdot 10^6$	2,56	$-5,00 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
145	$1C_7H_{14} + O = iC_6H_{13} + HCO$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
146	$3C_7H_{14} + O = iC_5H_{11} + CH_3CO$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
147	$1C_7H_{14} + O = C_5H_9 + C_2H_4 + OH$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$3,92 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
148	$1C_7H_{14} + O = iC_4H_7 + C_3H_6 + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
149	$1C_7H_{14} + O = iC_4H_8 + C_3H_5 + OH$	$1,80 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
150	$1C_7H_{14} + O = C_5H_{10} + C_2H_3 + OH$	$1,80 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
151	$3C_7H_{14} + O = C_5H_9 + C_2H_4 + OH$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$3,92 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
152	$3C_7H_{14} + O = C_4H_7 + C_3H_6 + OH$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
153	$3C_7H_{14} + O = C_4H_8 + C_3H_5 + OH$	$2,80 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
154	$3C_7H_{14} + O = C_5H_{10} + C_2H_3 + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
155	$1C_7H_{14} + OH = iC_6H_{13} + CH_2O$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,35 \cdot 10^4$	[5]
156	$3C_7H_{14} + OH = iC_5H_{11} + CH_3CHO$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,35 \cdot 10^4$	[5]
157	$1C_7H_{14} + OH = iC_7H_{13} + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,65 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,35 \cdot 10^4$	[5]
158	$3C_7H_{14} + OH = iC_7H_{13} + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,65 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,35 \cdot 10^4$	[5]
159	$1C_7H_{14} + OH = C_5H_9 + C_2H_4 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{10}$	1,05	$9,00 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
160	$1C_7H_{14} + OH = iC_4H_7 + C_3H_6 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
161	$1C_7H_{14} + OH = iC_4H_8 + C_3H_5 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
162	$1C_7H_{14} + OH = C_5H_{10} + C_2H_3 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
163	$3C_7H_{14} + OH = C_5H_9 + C_2H_4 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{10}$	1,05	$9,00 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
164	$3C_7H_{14} + OH = C_4H_7 + C_3H_6 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
165	$3C_7H_{14} + OH = C_4H_8 + C_3H_5 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
166	$3C_7H_{14} + OH = C_5H_{10} + C_2H_3 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
167	$1C_7H_{14} + O_2 = iC_7H_{13} + HO_2$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,01 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
168	$3C_7H_{14} + O_2 = iC_7H_{13} + HO_2$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,01 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
169	$1C_7H_{14} + CH_3 = iC_7H_{13} + CH_4$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,40 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
170	$3C_7H_{14} + CH_3 = iC_7H_{13} + CH_4$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,40 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
171	$1C_7H_{14} + HO_2 = iC_7H_{13} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	Оценка
172	$3C_7H_{14} + HO_2 = iC_7H_{13} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	—
173	$1C_7H_{14} + C_2H_5 = iC_7H_{13} + C_2H_6$	$1,70 \cdot 10^{11}$	0	$4,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
174	$3C_7H_{14} + C_2H_5 = iC_7H_{13} + C_2H_6$	$1,70 \cdot 10^{11}$	0	$4,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
175	$iC_7H_{13} = C_3H_4 + tC_4H_9$	$2,52 \cdot 10^{13}$	0	$1,51 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
176	$iC_7H_{13} = C_6H_{10} + CH_3$	$2,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,60 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,50 \cdot 10^3$	[5]
177	$iC_7H_{13} = C_2H_4 + C_5H_9$	$2,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	0	0	$8,50 \cdot 10^3$	[5]

Реакции с C_6H_y

178	$nC_6H_{14} = iC_5H_{11} + CH_3$	$3,00 \cdot 10^{17}$	0	$4,25 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[6]
179	$nC_6H_{14} = C_2H_5 + tC_4H_9$	$2,30 \cdot 10^{16}$	0	$4,10 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	Оценка
180	$nC_6H_{14} = iC_6H_{13} + H$	$2,00 \cdot 10^{18}$	0	$5,00 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	0	—
181	$nC_6H_{14} + H = iC_6H_{13} + H_2$	$5,10 \cdot 10^{14}$	0	$4,40 \cdot 10^3$	—	—	—	[19]
182	$nC_6H_{14} + O = iC_6H_{13} + OH$	$1,30 \cdot 10^{14}$	0	$2,20 \cdot 10^3$	—	—	—	[19]
183	$nC_6H_{14} + OH = iC_6H_{13} + H_2O$	$1,50 \cdot 10^{13}$	0	$5,00 \cdot 10^2$	—	—	—	[19]
184	$nC_6H_{14} + O_2 = iC_6H_{13} + HO_2$	$2,50 \cdot 10^{13}$	0	$2,50 \cdot 10^4$	—	—	—	[15]
185	$nC_6H_{14} + CH_3 = iC_6H_{13} + CH_4$	$2,20 \cdot 10^{11}$	0	$5,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
186	$nC_6H_{14} + HO_2 = iC_6H_{13} + H_2O_2$	$1,30 \cdot 10^{12}$	0	$9,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
187	$nC_6H_{14} + C_2H_5 = iC_6H_{13} + C_2H_6$	$1,70 \cdot 10^{10}$	0	$6,70 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
188	$nC_6H_{14} + C_2H_3 = iC_6H_{13} + C_2H_4$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
189	$nC_6H_{14} + C_3H_5 = iC_6H_{13} + C_3H_6$	$4,00 \cdot 10^{11}$	0	$9,80 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
190	$nC_6H_{14} + iC_4H_7 = iC_6H_{13} + iC_4H_8$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	—	—	—	[15]
191	$nC_6H_{14} + CH_3O = iC_6H_{13} + CH_3OH$	$3,20 \cdot 10^{10}$	0	$3,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
192	$iC_6H_{13} = 1C_6H_{12} + H$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,00 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,00 \cdot 10^2$	[5]
193	$iC_6H_{13} = C_5H_{10} + CH_3$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$1,30 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
194	$iC_6H_{13} = C_3H_6 + iC_3H_7$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,45 \cdot 10^3$	[5]
195	$iC_6H_{13} = tC_4H_9 + C_2H_4$	$2,50 \cdot 10^{13}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,45 \cdot 10^3$	[5]
196	$iC_6H_{13} = iC_4H_8 + C_2H_5$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
197	$iC_6H_{13} + O_2 = 1C_6H_{12} + HO_2$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
198	$1C_6H_{12} = C_3H_6 + C_3H_6$	$5,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,84 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
199	$1C_6H_{12} = iC_3H_7 + C_3H_5$	$7,00 \cdot 10^{15}$	0	$3,55 \cdot 10^4$	—	—	—	[5]
200	$1C_6H_{12} + H = C_6H_{11} + H_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$2,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$7,00 \cdot 10^3$	[5]
201	$1C_6H_{12} + H = iC_4H_7 + C_2H_4 + H_2$	$1,00 \cdot 10^7$	2	$3,85 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
202	$1C_6H_{12} + H = C_3H_5 + C_3H_6 + H_2$	$1,00 \cdot 10^7$	2	$2,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
203	$1C_6H_{12} + H = iC_4H_8 + C_2H_3 + H_2$	$1,00 \cdot 10^7$	2	$2,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
204	$1C_6H_{12} + O = C_6H_{11} + OH$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
205	$1C_6H_{12} + O = iC_4H_7 + C_2H_4 + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$3,92 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
206	$1C_6H_{12} + O = C_3H_5 + C_3H_6 + OH$	$1,80 \cdot 10^{13}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
207	$1C_6H_{12} + O = iC_4H_8 + C_2H_3 + OH$	$1,80 \cdot 10^{12}$	0	$2,60 \cdot 10^3$	—	—	—	[5]
208	$1C_6H_{12} + O = iC_5H_{11} + HCO$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
209	$1C_6H_{12} + O = iC_4H_9 + CH_3CO$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
210	$1C_6H_{12} + OH = iC_4H_7 + C_2H_4 + H_2O$	$2,00 \cdot 10^{10}$	1,05	$9,00 \cdot 10^2$	—	—	—	[5]
211	$1C_6H_{12} + OH = C_6H_{11} + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$6,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[8]
212	$1C_6H_{12} + OH = C_3H_5 + C_3H_6 + H_2O$	$6,50 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[5]
213	$1C_6H_{12} + OH = iC_4H_8 + C_2H_3 + H_2O$	$6,50 \cdot 10^9$	1,25	$3,50 \cdot 10^2$	—	—	—	[5]
214	$1C_6H_{12} + OH = iC_5H_{11} + CH_2O$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
215	$1C_6H_{12} + OH = iC_4H_9 + CH_3CHO$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	[5]
216	$1C_6H_{12} + O_2 = C_6H_{11} + HO_2$	$3,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,01 \cdot 10^4$	—	—	—	Оценка
217	$1C_6H_{12} + CH_3 = C_6H_{11} + CH_4$	$5,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,40 \cdot 10^3$	—	—	—	[8]
218	$1C_6H_{12} + HO_2 = C_6H_{11} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$8,54 \cdot 10^3$	—	—	—	Оценка
219	$1C_6H_{12} + C_2H_5 = C_6H_{11} + C_2H_6$	$1,70 \cdot 10^{11}$	0	$4,00 \cdot 10^3$	—	—	—	—
220	$C_6H_{11} = C_3H_5 + C_3H_6$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	0	0	$8,50 \cdot 10^3$	[5]
221	$C_6H_{11} = C_6H_{10} + H$	$2,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,40 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,00 \cdot 10^2$	[5]
222	$C_6H_{11} = C_2H_5 + C_4H_6$	$5,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	—	—	—	[8]
223	$C_6H_{11} + H = C_6H_{10} + H_2$	$3,16 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[8]
224	$C_6H_{11} + O_2 = C_6H_{10} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	[5]
225	$C_6H_{11} + CH_3 = C_6H_{10} + CH_4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[8]
226	$C_6H_{11} + C_2H_3 = C_6H_{10} + C_2H_4$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[8]
227	$C_6H_{11} + C_3H_5 = C_6H_{10} + C_3H_6$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[8]
228	$C_6H_{10} = C_3H_5 + C_3H_5$	$2,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,80 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]

Реакции с C_5H_y

229	$nC_5H_{12} = CH_3 + tC_4H_9$	$6,31 \cdot 10^{16}$	0	$4,30 \cdot 10^4$	$1,90 \cdot 10^{13}$	0	0	[6]
230	$nC_5H_{12} = iC_5H_{11} + H$	$1,00 \cdot 10^{15}$	0	$5,04 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	0	[6]
231	$nC_5H_{12} = C_2H_5 + iC_3H_7$	$6,31 \cdot 10^{16}$	0	$4,13 \cdot 10^4$	$7,94 \cdot 10^{12}$	0	0	[6]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
232	$nC_5H_{12} + H = iC_5H_{11} + H_2$	$5,62 \cdot 10^7$	2	$3,88 \cdot 10^3$	$3,24 \cdot 10^{12}$	0	$7,91 \cdot 10^3$	[6]
233	$nC_5H_{12} + O = iC_5H_{11} + OH$	$1,00 \cdot 10^7$	2,4	$2,25 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,10 \cdot 10^3$	[6]
234	$nC_5H_{12} + OH = iC_5H_{11} + H_2O$	$1,00 \cdot 10^7$	1,6	$2,00 \cdot 10^1$	$1,00 \cdot 10^{10}$	1,25	$1,11 \cdot 10^4$	[6]
235	$nC_5H_{12} + O_2 = iC_5H_{11} + HO_2$	$9,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,40 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	[6]
236	$nC_5H_{12} + CH_3 = iC_5H_{11} + CH_4$	$6,60 \cdot 10^{14}$	0	$1,20 \cdot 10^4$	—	—	—	[20]
237	$nC_5H_{12} + HO_2 = iC_5H_{11} + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$3,60 \cdot 10^3$	[6]
238	$nC_5H_{12} + C_3H_5 = iC_5H_{11} + C_3H_6$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$8,80 \cdot 10^3$	—	—	—	[20]
239	$nC_5H_{12} + CH_3O = iC_5H_{11} + CH_3OH$	$3,00 \cdot 10^{11}$	0	$2,50 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{10}$	1,25	$3,60 \cdot 10^3$	[6]
240	$nC_5H_{12} + iC_4H_7 = iC_5H_{11} + iC_4H_8$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,01 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,18 \cdot 10^3$	[6]
241	$nC_5H_{12} + C_4H_7 = iC_5H_{11} + C_4H_8$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,01 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,18 \cdot 10^3$	[6]
242	$nC_5H_{12} + iC_3H_7 = iC_5H_{11} + C_3H_8$	$3,26 \cdot 10^{11}$	0	$6,20 \cdot 10^3$	$3,26 \cdot 10^{11}$	0	$6,20 \cdot 10^3$	[6]
243	$nC_5H_{12} + iC_4H_9 = iC_5H_{11} + C_4H_{10}$	$3,26 \cdot 10^{11}$	0	$6,20 \cdot 10^3$	$3,26 \cdot 10^{11}$	0	$6,20 \cdot 10^3$	[6]
244	$nC_5H_{12} + tC_4H_9 = iC_5H_{11} + C_4H_{10}$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$6,50 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$5,24 \cdot 10^3$	[6]
245	$iC_5H_{11} = iC_3H_7 + C_2H_4$	$3,20 \cdot 10^{13}$	0	$1,43 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
246	$iC_5H_{11} = iC_4H_8 + CH_3$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,60 \cdot 10^4$	—	—	—	[18]
247	$iC_5H_{11} = C_5H_{10} + H$	$1,90 \cdot 10^{13}$	0	$2,04 \cdot 10^4$	$7,94 \cdot 10^{12}$	0	$1,46 \cdot 10^3$	[6]
248	$iC_5H_{11} = C_3H_6 + C_2H_5$	$1,01 \cdot 10^{12}$	0	$1,48 \cdot 10^4$	$3,98 \cdot 10^{10}$	0	$3,78 \cdot 10^3$	[6]
249	$iC_5H_{11} + O_2 = C_5H_{10} + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,10 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$9,10 \cdot 10^3$	[6]
250	$C_5H_{10} + H = C_5H_9 + H_2$	$2,80 \cdot 10^{13}$	0	$2,01 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
251	$C_5H_{10} = CH_3 + C_4H_7$	$1,00 \cdot 10^{19}$	-1	$4,59 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[3]
252	$C_5H_{10} = C_3H_6 + C_2H_4$	$3,12 \cdot 10^{15}$	0	$2,89 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
253	$C_5H_{10} + O = C_3H_6 + CH_3CHO$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,40 \cdot 10^4$	[3]
254	$C_5H_{10} + O = iC_4H_8 + CH_2O$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,25 \cdot 10^4$	[3]
255	$C_5H_{10} + O = C_5H_9 + OH$	$2,80 \cdot 10^{14}$	0	$4,30 \cdot 10^2$	—	—	—	[13]
256	$C_5H_{10} + O = nC_3H_7 + CH_3CO$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,50 \cdot 10^4$	[3]
257	$C_5H_{10} + O = C_4H_8 + CH_2O$	$1,11 \cdot 10^{13}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,25 \cdot 10^4$	[3]
258	$C_5H_{10} + O = C_3H_5 + C_2H_4 + OH$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$3,52 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
259	$C_5H_{10} + O = C_3H_6 + C_2H_3 + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$3,52 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
260	$C_5H_{10} + OH = iC_3H_7 + CH_3CHO$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$2,50 \cdot 10^4$	[3]
261	$C_5H_{10} + OH = iC_4H_9 + CH_2O$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,50 \cdot 10^4$	[3]
262	$C_5H_{10} + OH = C_3H_5 + C_2H_4 + H_2O$	$2,00 \cdot 10^9$	1,2	$6,21 \cdot 10^1$	—	—	—	[13]
263	$C_5H_{10} + OH = C_3H_6 + C_2H_3 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^9$	1,2	$5,21 \cdot 10^1$	—	—	—	[13]
264	$C_5H_{10} + OH = nC_4H_9 + CH_2O$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,50 \cdot 10^4$	[3]
265	$C_5H_{10} + OH = nC_3H_7 + CH_3CHO$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$2,50 \cdot 10^4$	[3]
266	$C_5H_{10} + OH = C_5H_9 + H_2O$	$6,80 \cdot 10^{13}$	0	$1,54 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
267	$C_5H_{10} + O_2 = C_5H_9 + HO_2$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,01 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
268	$C_5H_{10} + CH_3 = C_5H_9 + CH_4$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,40 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
269	$C_5H_{10} + HO_2 = C_5H_9 + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,54 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
270	$C_5H_{10} + C_2H_5 = C_5H_9 + C_2H_6$	$1,70 \cdot 10^{11}$	0	$4,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
271	$C_5H_9 = C_3H_5 + C_2H_4$	$2,50 \cdot 10^{13}$	0	$1,51 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
272	$C_5H_9 = C_4H_6 + CH_3$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,61 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
273	$C_5H_9 = C_5H_8 + H$	$6,31 \cdot 10^{12}$	0	$1,71 \cdot 10^4$	—	—	—	[20]
274	$C_5H_9 + O_2 = C_5H_8 + HO_2$	$2,10 \cdot 10^{10}$	0	0	—	—	—	[20]
275	$C_5H_9 + C_2H_3 = C_5H_8 + C_2H_4$	$4,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[20]
276	$C_5H_9 + C_3H_5 = C_5H_8 + C_3H_6$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[20]
277	$C_5H_9 + C_4H_7 = C_5H_8 + C_4H_8$	$1,16 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[20]
278	$C_5H_9 + iC_4H_7 = C_5H_8 + iC_4H_8$	$1,16 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[20]
279	$C_5H_8 = C_2H_3 + C_3H_5$	$5,00 \cdot 10^{15}$	0	$3,64 \cdot 10^4$	—	—	—	[20]
280	$C_5H_8 + O = CH_3CHO + C_3H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[20]
281	$C_5H_8 + O = CH_2O + C_4H_6$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[20]
282	$C_5H_8 + OH = CH_3CHO + C_3H_5$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[20]
283	$C_5H_8 + OH = CH_2O + C_4H_7$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[20]

Реакции с C_4H_y

284	$iC_4H_{10} = iC_3H_7 + CH_3$	$1,00 \cdot 10^{17}$	0	$4,10 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]
285	$iC_4H_{10} = tC_4H_9 + H$	$1,00 \cdot 10^{15}$	0	$4,10 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	[5]
286	$iC_4H_{10} + H = tC_4H_9 + H_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$3,60 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$8,00 \cdot 10^3$	[5]
287	$iC_4H_{10} + H = iC_4H_9 + H_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$4,10 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$7,54 \cdot 10^3$	[5]
288	$iC_4H_{10} + O = tC_4H_9 + OH$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,60 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,80 \cdot 10^3$	[5]
289	$iC_4H_{10} + O = iC_4H_9 + OH$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,80 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,80 \cdot 10^3$	[5]
290	$iC_4H_{10} + OH = tC_4H_9 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,00 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	[5]
291	$iC_4H_{10} + OH = iC_4H_9 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^4$	3,02	$-3,00 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^4$	3,02	$1,04 \cdot 10^4$	[5]
292	$iC_4H_{10} + O_2 = iC_4H_9 + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,30 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,00 \cdot 10^3$	[5]
293	$iC_4H_{10} + O_2 = tC_4H_9 + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$2,40 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,00 \cdot 10^3$	[5]
294	$iC_4H_{10} + CH_3 = iC_4H_9 + CH_4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,70 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	[5]
295	$iC_4H_{10} + CH_3 = tC_4H_9 + CH_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$5,10 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$7,50 \cdot 10^3$	[5]
296	$iC_4H_{10} + HO_2 = tC_4H_9 + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$7,20 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$3,70 \cdot 10^3$	[5]
297	$iC_4H_{10} + HO_2 = iC_4H_9 + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$9,20 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$3,70 \cdot 10^3$	[5]
298	$iC_4H_{10} + C_2H_5 = iC_4H_9 + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,90 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,05 \cdot 10^4$	[3]
299	$iC_4H_{10} + C_2H_5 = tC_4H_9 + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$5,20 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$6,30 \cdot 10^3$	[3]
300	$iC_4H_{10} + C_2H_3 = tC_4H_9 + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$9,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,25 \cdot 10^4$	[3]
301	$iC_4H_{10} + C_2H_3 = iC_4H_9 + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$9,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,25 \cdot 10^4$	[3]
302	$iC_4H_{10} + CH_3O = tC_4H_9 + CH_3OH$	$3,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]
303	$iC_4H_{10} + CH_3O = iC_4H_9 + CH_3OH$	$6,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[15]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
304	$C_4H_{10} + C_2H_3 = nC_4H_9 + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$9,00 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,25 \cdot 10^4$	[3]
305	$C_4H_{10} + C_2H_5 = nC_4H_9 + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$6,70 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$6,50 \cdot 10^3$	[5]
306	$C_4H_{10} + C_2H_5 = sC_4H_9 + C_2H_6$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$5,20 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,85 \cdot 10^3$	[5]
307	$C_4H_{10} + C_3H_5 = nC_4H_9 + C_3H_6$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,02 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,85 \cdot 10^3$	[5]
308	$C_4H_{10} + C_3H_5 = sC_4H_9 + C_3H_6$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$8,20 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,85 \cdot 10^3$	[5]
309	$iC_4H_9 = C_3H_6 + CH_3$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,60 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,55 \cdot 10^3$	[5]
310	$tC_4H_9 = C_2H_4 + C_2H_5$	$4,50 \cdot 10^{13}$	0	$1,50 \cdot 10^4$	—	—	—	[21]
311	$iC_4H_9 = iC_4H_8 + H$	$1,00 \cdot 10^{15}$	0	$1,70 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,00 \cdot 10^2$	[5]
312	$tC_4H_9 + O_2 = iC_4H_8 + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,40 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,55 \cdot 10^3$	[5]
313	$tC_4H_9 + C_2H_2 = C_6H_{11}$	$7,23 \cdot 10^{10}$	0	$4,32 \cdot 10^3$	—	—	—	[21]
314	$tC_4H_9 + tC_4H_9 = iC_4H_{10} + iC_4H_8$	$7,23 \cdot 10^{16}$	-1,73	0	—	—	—	[21]
315	$iC_4H_9 + O_2 = iC_4H_8 + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,50 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,55 \cdot 10^3$	[5]
316	$iC_4H_9 + H_2 = iC_4H_{10} + H$	$1,90 \cdot 10^{-2}$	4,24	$4,51 \cdot 10^3$	—	—	—	[21]
317	$iC_4H_9 + C_2H_2 = C_6H_{11}$	$7,23 \cdot 10^{10}$	0	$4,32 \cdot 10^3$	—	—	—	[21]
318	$nC_4H_9 + sC_4H_9 = C_4H_{10} + C_4H_8$	$7,23 \cdot 10^{16}$	-1,73	0	—	—	—	[21]
319	$sC_4H_9 = C_4H_8 + H$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,96 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$7,56 \cdot 10^2$	[5]
320	$iC_4H_8 = C_4H_6 + H_2$	$3,00 \cdot 10^{15}$	0	$3,25 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
321	$iC_4H_8 = C_2H_3 + C_2H_5$	$2,00 \cdot 10^{18}$	-1	$4,80 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
322	$iC_4H_8 + M = C_3H_5 + CH_3 + M$	$4,00 \cdot 10^{18}$	0	$3,70 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
323	$iC_4H_8 + M = iC_4H_7 + H + M$	$2,00 \cdot 10^{17}$	0	$4,30 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	[5]
324	$iC_4H_8 + H = iC_4H_7 + H_2$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,90 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,25 \cdot 10^4$	[5]
325	$iC_4H_8 + O = iC_4H_7 + OH$	$1,00 \cdot 10^5$	2,56	$-5,50 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,46 \cdot 10^4$	[5]
326	$iC_4H_8 + O = iC_3H_7 + HCO$	$1,00 \cdot 10^6$	2,34	$-5,50 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^5$	2,34	$4,03 \cdot 10^4$	[5]
327	$iC_4H_8 + O = C_3H_6 + CH_2O$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[13]
328	$iC_4H_8 + O = C_2H_5 + CH_3 + CO$	$2,60 \cdot 10^{13}$	0	$4,00 \cdot 10^1$	—	—	—	[13]
329	$iC_4H_8 + O = CH_3CHO + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,25 \cdot 10^4$	[5]
330	$iC_4H_8 + OH = CH_3CHO + C_2H_5$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,00 \cdot 10^4$	[5]
331	$iC_4H_8 + OH = iC_3H_7 + CH_2O$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,60 \cdot 10^3$	[5]
332	$iC_4H_8 + OH = iC_4H_7 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$6,50 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,36 \cdot 10^4$	[5]
333	$iC_4H_8 + OH = C_2H_6 + CH_3 + CO$	$2,00 \cdot 10^{10}$	0	0	—	—	—	[13]
334	$iC_4H_8 + O_2 = iC_4H_7 + HO_2$	$4,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,00 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
335	$iC_4H_8 + CH_3 = iC_4H_7 + CH_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,40 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,46 \cdot 10^4$	[5]
336	$iC_4H_8 + HO_2 = iC_4H_7 + H_2O_2$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
337	$iC_4H_8 + C_2H_5 = C_4H_7 + C_2H_6$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,03 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
338	$C_4H_8 = C_4H_7 + H$	$1,00 \cdot 10^{19}$	-1	$4,85 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	0	[5]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
339	$C_4H_8 = C_4H_6 + H_2$	$3,00 \cdot 10^{15}$	0	$3,25 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
340	$C_4H_8 + M = CH_3 + C_3H_5 + M$	$4,00 \cdot 10^{18}$	0	$3,70 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
341	$C_4H_8 + H = C_4H_7 + H_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,90 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$7,00 \cdot 10^3$	[5]
342	$C_4H_8 + O = CH_3CHO + C_2H_4$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$4,25 \cdot 10^4$	[5]
343	$C_4H_8 + O = iC_3H_7 + HCO$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,25 \cdot 10^4$	[5]
344	$C_4H_8 + O = C_2H_5 + CH_3 + CO$	$1,60 \cdot 10^{13}$	0	$4,00 \cdot 10^1$	—	—	—	[13]
345	$C_4H_8 + OH = CH_3CHO + C_2H_5$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,00 \cdot 10^4$	[5]
346	$C_4H_8 + OH = C_4H_7 + H_2O$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$6,00 \cdot 10^2$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,40 \cdot 10^4$	[5]
347	$C_4H_8 + OH = C_2H_6 + CH_3 + CO$	$1,00 \cdot 10^{10}$	0	0	—	—	—	[13]
348	$C_4H_8 + O_2 = C_4H_7 + HO_2$	$2,00 \cdot 10^{12}$	0	$2,00 \cdot 10^4$	—	—	—	[13]
349	$C_4H_8 + CH_3 = C_4H_7 + CH_4$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,67 \cdot 10^3$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	$8,00 \cdot 10^3$	[5]
350	$C_4H_8 + HO_2 = C_4H_7 + H_2O_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
351	$C_4H_8 + C_2H_5 = C_4H_7 + C_2H_6$	$2,00 \cdot 10^{11}$	0	$4,03 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
352	$C_4H_8 + C_3H_5 = C_4H_7 + C_3H_6$	$8,00 \cdot 10^{10}$	0	$6,52 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
353	$iC_4H_7 + M = C_3H_4 + CH_3 + M$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,63 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,75 \cdot 10^3$	[3]
354	$iC_4H_7 + M = C_4H_6 + H + M$	$1,20 \cdot 10^{14}$	0	$2,48 \cdot 10^4$	$3,98 \cdot 10^{13}$	0	$6,55 \cdot 10^2$	[3]
355	$iC_4H_7 + M = C_2H_4 + C_2H_3 + M$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,86 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,50 \cdot 10^2$	[3]
356	$iC_4H_7 + H = C_4H_6 + H_2$	$3,16 \cdot 10^{13}$	0	0	$1,15 \cdot 10^{13}$	0	$2,86 \cdot 10^4$	[3]
357	$iC_4H_7 + O_2 = C_4H_6 + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,50 \cdot 10^3$	[3]
358	$iC_4H_7 + CH_3 = C_4H_6 + CH_4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[13]
359	$iC_4H_7 + C_2H_3 = C_4H_6 + C_2H_4$	$3,98 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,15 \cdot 10^{13}$	0	$2,91 \cdot 10^4$	[3]
360	$iC_4H_7 + C_2H_5 = C_4H_6 + C_2H_6$	$3,98 \cdot 10^{12}$	0	0	$3,24 \cdot 10^{12}$	0	$2,51 \cdot 10^4$	[3]
361	$iC_4H_7 + C_2H_5 = iC_4H_8 + C_2H_4$	$5,01 \cdot 10^{11}$	0	0	$8,51 \cdot 10^{11}$	0	$2,84 \cdot 10^4$	[3]
362	$iC_4H_7 + C_3H_5 = C_4H_6 + C_3H_6$	$1,40 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[13]
363	$iC_4H_7 + iC_4H_7 = C_4H_6 + iC_4H_8$	$3,16 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[13]
364	$C_4H_7 + M = C_4H_6 + H + M$	$1,20 \cdot 10^{14}$	0	$2,48 \cdot 10^4$	$3,98 \cdot 10^{13}$	0	$6,55 \cdot 10^2$	[3]
365	$C_4H_7 + M = C_2H_4 + C_2H_3 + M$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$1,86 \cdot 10^4$	$9,10 \cdot 10^4$	1	$-1,73 \cdot 10^3$	[3]
366	$C_4H_7 + M = C_3H_4 + CH_3 + M$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,63 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	$3,75 \cdot 10^3$	[3]
367	$C_4H_7 + H = C_4H_6 + H_2$	$3,16 \cdot 10^{13}$	0	0	$1,15 \cdot 10^{13}$	0	$2,86 \cdot 10^4$	[3]
368	$C_4H_7 + O_2 = C_4H_6 + HO_2$	$1,00 \cdot 10^{11}$	0	0	$1,15 \cdot 10^{10}$	0	$-4,54 \cdot 10^2$	[3]
369	$C_4H_7 + CH_3 = C_4H_6 + CH_4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[13]
370	$C_4H_7 + C_3H_5 = C_4H_6 + C_3H_6$	$1,40 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[13]
371	$C_4H_7 + C_4H_7 = C_4H_6 + C_4H_8$	$3,16 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[13]
372	$C_4H_7 + C_2H_3 = C_4H_6 + C_2H_4$	$3,98 \cdot 10^{12}$	0	0	$1,15 \cdot 10^{13}$	0	$2,91 \cdot 10^4$	[3]
373	$C_4H_7 + C_2H_5 = C_4H_6 + C_2H_6$	$3,98 \cdot 10^{12}$	0	0	$3,24 \cdot 10^{12}$	0	$2,51 \cdot 10^4$	[3]
374	$C_4H_7 + C_2H_5 = C_4H_8 + C_2H_4$	$5,01 \cdot 10^{11}$	0	0	$8,51 \cdot 10^{11}$	0	$2,84 \cdot 10^4$	[3]

Продолжение табл. 1

1	2	3	4	5	6	7	8	9
375	$C_4H_6 = C_2H_3 + C_2H_3$	$4,00 \cdot 10^{19}$	-1	$4,90 \cdot 10^4$	—	—	—	[3]
376	$C_4H_6 + H = C_3H_4 + CH_3$	$5,00 \cdot 10^{12}$	0	$1,04 \cdot 10^3$	—	—	—	[13]
377	$C_4H_6 + H = C_4H_5 + H_2$	$3,00 \cdot 10^7$	2	$3,00 \cdot 10^3$	—	—	—	[11]
378	$C_4H_6 + O = C_2H_4 + CH_2CO$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$6,31 \cdot 10^{11}$	0	$4,75 \cdot 10^4$	[3]
379	$C_4H_6 + OH = C_2H_5 + CH_2CO$	$1,00 \cdot 10^{12}$	0	0	$3,72 \cdot 10^{12}$	0	$1,51 \cdot 10^4$	[3]
380	$C_4H_6 + C_3H_3 = C_4H_5 + C_3H_4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,13 \cdot 10^4$	—	—	—	[11]
381	$C_4H_5 = C_4H_4 + H$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,51 \cdot 10^4$	—	—	—	[22]
382	$C_4H_5 = C_2H_3 + C_2H_2$	$2,00 \cdot 10^{15}$	0	$2,31 \cdot 10^4$	—	—	—	[22]
383	$C_4H_5 + H = C_4H_4 + H_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	0	—	—	—	[22]
384	$C_4H_5 + OH = C_4H_4 + H_2O$	$2,00 \cdot 10^7$	2	$5,03 \cdot 10^2$	—	—	—	[22]
385	$C_4H_5 + O_2 = C_4H_4 + HO_2$	$1,20 \cdot 10^{11}$	0	0	—	—	—	[22]
386	$C_4H_4 = C_4H_3 + H$	$8,63 \cdot 10^{12}$	0	$2,97 \cdot 10^4$	—	—	—	[22]
387	$C_4H_4 + H = C_4H_3 + H_2$	$3,00 \cdot 10^7$	2	$2,53 \cdot 10^3$	—	—	—	[22]
388	$C_4H_4 + OH = C_4H_3 + H_2O$	$7,50 \cdot 10^6$	2	$2,53 \cdot 10^3$	—	—	—	[22]
389	$C_4H_4 + C_2H_3 = C_2H_4 + C_4H_3$	$5,00 \cdot 10^{11}$	0	$8,15 \cdot 10^3$	—	—	—	[22]
390	$C_4H_4 + C_2H = C_4H_2 + C_2H_3$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[22]
391	$C_4H_4 + C_2H = C_4H_3 + C_2H_2$	$4,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[22]
392	$C_4H_3 + M = C_4H_2 + H + M$	$2,00 \cdot 10^{15}$	0	$2,40 \cdot 10^4$	—	—	—	[22]
393	$C_4H_3 + H = C_4H_2 + H_2$	$5,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[22]
394	$C_4H_3 + O = CH_2CO + C_2H$	$2,00 \cdot 10^{15}$	0	0	—	—	—	[22]
395	$C_4H_3 + H_2 = C_2H_2 + C_2H_3$	$5,01 \cdot 10^{10}$	0	$1,00 \cdot 10^4$	—	—	—	[11]
396	$C_4H_3 + OH = C_4H_2 + H_2O$	$3,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[22]
397	$C_4H_3 + CH_2 = C_3H_4 + C_2H$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[11]
398	$C_4H_3 + O_2 = CH_2CO + C_2HO$	$1,90 \cdot 10^{12}$	0	0	—	—	—	[22]
399	$C_4H_2 + O = CO + cC_3H_2$	$2,80 \cdot 10^{13}$	0	$8,70 \cdot 10^2$	—	—	—	[22]
400	$C_4H_2 + H = C_4H + H_2$	$1,00 \cdot 10^{14}$	0	$1,10 \cdot 10^4$	$1,00 \cdot 10^{13}$	0	$1,1 \cdot 10^3$	[3]
401	$C_4H_2 + C_2H = C_4H + C_2H_2$	$2,00 \cdot 10^{13}$	0	0	—	—	—	[11]

Примечание. $k_q^{+(-)} = A_q T^{m_q} \exp(-E_{a,q}/T)$, размерность $k_q^{+(-)}$ — $(\text{см}^3/\text{моль})^{m-1} \text{с}^{-1}$, где m — количество частиц, участвующих в реакции.

один атом водорода [14].

3. *Распад алкильных радикалов.* Эти реакции особенно важны для относительно высоких температур ($T_0 \geq 850$ К), поскольку увеличивают число алкильных радикалов с меньшим числом атомов углерода, которые, в свою очередь, распадаясь увеличивают число активных частиц, например, $3\text{-C}_8\text{H}_{17} = \text{изо-C}_4\text{H}_8 + \text{транс-C}_4\text{H}_9$, $\text{транс-C}_4\text{H}_9 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{C}_2\text{H}_5$,

$\text{C}_2\text{H}_5 = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}$.

4. *Реакции взаимодействия алкильных радикалов с O_2 :* $\text{R} + \text{O}_2 = \text{Q} + \text{HO}_2$; $\text{R} + \text{O}_2 = \text{ROO}$. Взаимодействие алкильных радикалов с кислородом ведет к образованию алкилпероксида ROO , который при высоких температурах быстро распадается на олефин Q и радикал HO_2 , не являющийся активным центром в реакциях разветвления или продолжения це-

пи. Однако этот тип реакций служит основным путем наработки олефинов при средних и высоких температурах. Для низких температур ($T_0 < 850$ К) распад алкилпероксида протекает медленно и реакция образования радикала ROO с нулевой энергией активации является основной для развития низкотемпературного цепного горения. Скорость этих реакций сильно влияет на длительность периода индукции, поскольку от нее зависит скорость образования активных радикалов на начальном этапе окисления при низких начальных температурах.

5. *Взаимодействие олефинов с радикалами и распад олефинов.* Олефины взаимодействуют с легкими радикалами H, O, OH, HO₂, CH₃ по месту расположения двойной связи с образованием более мелких углеводородных радикалов и промежуточных веществ типа формиллов, формальдегидов и ацетальальдегидов. Анализ данных [5] показывает относительно слабую чувствительность результатов численного моделирования процесса воспламенения к маршрутам реакций образования этих продуктов. С учетом этого и в силу того, что реакции с участием больших олефинов плохо изучены, а константы скорости этих процессов оценены очень приблизительно, изомеры олефинов, за исключением 1-C₇H₁₄ и 3-C₇H₁₄, не включались в реакционный механизм. Константы скоростей распада 1-C₇H₁₄ и 3-C₇H₁₄ задаются такими же, как и для реакции разложения 1-C₆H₁₂ [13].

6. *Внутренняя изомеризация между ROO и QOOH.* Внутренняя изомеризация пероксильных радикалов является важным процессом при низкотемпературном режиме воспламенения и ведет к образованию гидропероксидалькильных радикалов через образование внутренних колец [14]. Величина кольца зависит от места расположения атомов кислорода в молекуле и, в свою очередь, определяет величину энергетического барьера реакции. В связи с этим мы сохранили разбиение гидропероксидалькильных, гидропероксидалькилпероксидных радикалов на изомеры, сократив их количество с 18 до 3. Скорости этих реакций определялись аналогично скоростям изомеризации для алкильных радикалов [14].

7. *Распад радикалов QOOH с образованием олефинов и легких радикалов.* Эти реакции идут по двум каналам и являются основными реакциями наработки свободных радикалов

OH и HO₂ при низкотемпературном режиме: $QOOH = Q + HO_2$, $QOOH = Q' + CH_2O + OH$. Распад гидропероксидалькилов проходит по месту самой слабой углеродной связи и принимается одинаковым для всех изомеров. Последующие реакции взаимодействия олефинов с легкими радикалами мало влияют на процесс воспламенения при низких температурах.

8. *Реакции образования гидропероксидалькилпероксидов:* $QOOH + O_2 = OOQOOH$. Гидропероксидалькилы интенсивно (с нулевой энергией активации) реагируют с молекулярным кислородом, формируя гидропероксидалькилпероксидные радикалы OOQOOH, которые заметно влияют на образование активных радикалов OH, CH₃, C₂H₅ на начальной стадии при низких начальных температурах.

9. *Распад OOQOOH.* Гидропероксидалькилпероксиды распадаются на мелкие альдегиды и гидроксильные радикалы OH, ускоряющие протекание цепного процесса.

СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

Для оценки возможностей предложенной кинетической модели проводилось сравнение с данными по пиролизу изооктана [18] и данными измерения времени задержки воспламенения смеси *изо*-C₈H₁₈ + воздух [26], полученными в ударных трубах в широких интервалах значений p_0 и T_0 . В обоих случаях измерения проводились за фронтом отраженной от плоской стенки ударной волны, движущейся по исследуемой смеси с заданной скоростью. При этом в области за отраженной ударной волной разложение изооктана или воспламенение горючей смеси происходит при постоянной плотности. Поскольку характерные времена химических реакций при рассматриваемых условиях ($\tau_{ch} \approx 10^{-3} \div 10^{-2}$ с) существенно меньше характерных времен диффузии и теплопроводности ($\tau_d \approx 1$ с), то при теоретическом анализе можно рассматривать воспламенение или разложение изооктана при постоянном объеме ($V = \text{const}$) без учета отвода тепла в стенки, полагая, что между колебательными, вращательными и поступательными степенями свободы молекул существует термодинамическое равновесие, а газ при этом можно считать невязким и нетеплопроводным [27, 28]. Система уравнений, описывающая изменение температуры, давления и состава смеси во времени, должна включать в этом случае урав-

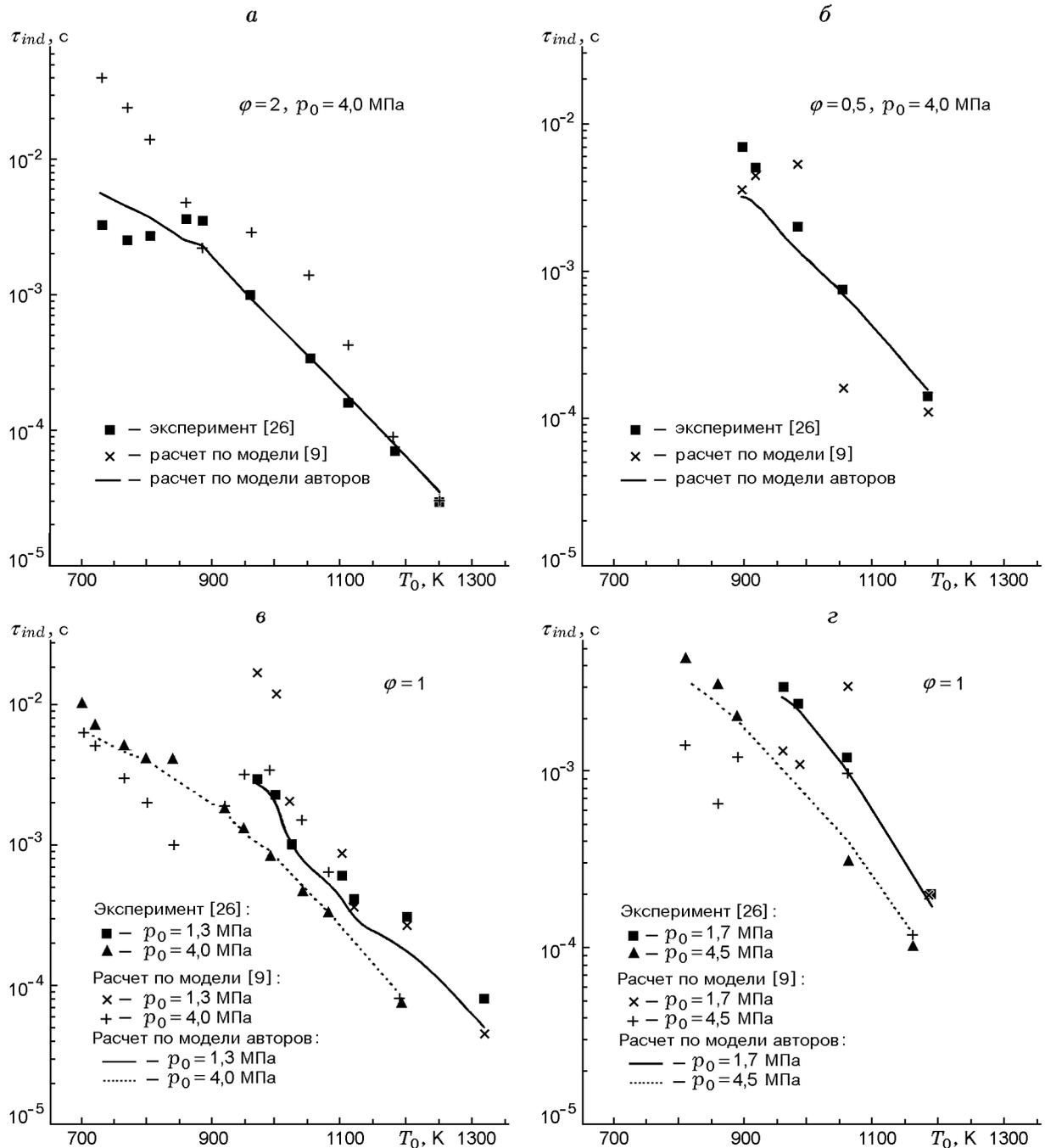
Рис. 2. Зависимость времени задержки воспламенения от температуры для смесей *изо*-C₈H₁₈ + воздух

Таблица 2
 Состав продуктов пиролиза *изо*-C₈H₁₈, измеренных в [18]
 и рассчитанных с использованием предлагаемой модели при различных значениях p , T

T_0 , К		1155	1210	1285	1355	1424	1470
p_0 , МПа		0,5	0,7	0,9	1,7	3	5
Степень разложения <i>изо</i> -C ₈ H ₁₈ , %		2,32	11,4	32	62,1	82,1	92,5
Мольные доли компонентов, %							
C ₂ H ₄	расчет	51,68	53,3	54,51	57,69	59,07	59,83
	эксперимент	52	50,4	56,8	61,2	64,9	65,2
C ₃ H ₆	расчет	16,72	16,95	16,18	14,32	12,67	11,54
	эксперимент	12,6	13,3	12,3	12,3	10,8	10,4
C ₂ H ₂	расчет	0,03	0,17	0,39	1,22	2,32	3,46
	эксперимент	—	—	0,9	0,7	2,1	2,6
CH ₄	расчет	9,78	9,29	10	10,64	9,23	10,09
	эксперимент	13,7	13,8	11,2	9,9	9,9	10,3
C ₂ H ₆	расчет	2,35	4,15	4,89	4,85	4,29	3,52
	эксперимент	3,3	3,7	3,8	4,3	4,8	4,8
C ₄ H ₆	расчет	0,07	0,29	0,54	1,4	2,28	3,23
	эксперимент	—	—	1,1	1,7	2,6	2,8
<i>изо</i> -C ₄ H ₈	расчет	6,29	6,62	7,01	6,36	5,22	3,84
	эксперимент	7,7	7,8	7	6	3,5	2,8
1-C ₆ H ₁₂	расчет	7,28	5,65	4,17	1,44	0,55	0,18
	эксперимент	4	4,3	2,1	0,8	0,1	0
C ₅ H ₁₀	расчет	2,72	2,74	2,62	1,91	1,32	0,81
	эксперимент	4,6	4,1	2,8	1,4	0,2	0,02

нение сохранения энергии, уравнения для изменения концентраций частиц, участвующих в химических реакциях, и уравнение состояния. Численное интегрирование этих уравнений проводилось так же, как и в [17].

В табл. 2 представлены концентрации образующихся при пиролизе *изо*-C₈H₁₈ компонентов смеси (в мольных долях γ_i), полученные в эксперименте [18] при различных значениях температуры и давления и соответствующей степени разложения *изо*-C₈H₁₈, а также рассчитанные с использованием предлагаемой кинетической модели. Видно, что для большинства компонентов соответствие рассчитанных и измеренных значений γ_i удовлетворительное. Некоторое расхождение между экспериментальными и расчетными данными в области низких значений p_0 и T_0 и малой степени

разложения *изо*октана может быть обусловлено неточностью определения скорости падающей ударной волны, а следовательно, давления и температуры за отраженной ударной волной в эксперименте.

Экспериментально измеренные и рассчитанные по разработанной в данной работе модели значения τ_{ind} для богатых ($\varphi = 2$), бедных ($\varphi = 0,5$) и стехиометрических ($\varphi = 1$) смесей *изо*-C₈H₁₈ + воздух приведены для сравнения на рис. 2. Здесь же даны и значения τ_{ind} , полученные с использованием эмпирической модели [9]. Видно, что модель, предложенная в данной работе, хорошо описывает экспериментальные значения τ_{ind} для смесей с $\varphi = 0,5; 1; 2$ как в низко-, так и в высокотемпературной области в диапазоне $p_0 = 1,3 \div 4$ МПа. В то же время модель [9] дает правильные значения τ_{ind}

лишь при $T_0 = 1200$ К. При других начальных температурах различие между измеренными и рассчитанными значениями времени задержки воспламенения может достигать $3 \div 15$ раз. Это говорит о том, что использование эмпирических механизмов для описания воспламенения тяжелых углеводородов возможно только в весьма ограниченном диапазоне параметров, а информацию о механизмах образования активных радикалов и развития цепных реакций, инициирующих горение, можно получить только при использовании достаточно детальных кинетических схем.

АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ

Разработанная кинетическая модель позволяет провести анализ особенностей механизмов воспламенения изооктана в смеси с O_2 и воздухом в зависимости от начальных параметров газа и оценить вклад различных стадий в развитие процесса.

На рис. 3 и 4 представлены результаты расчета изменения во времени концентраций активных частиц O , H , OH , HO_2 , CH_3 , C_2H_5 (а) и некоторых тяжелых углеводородных радикалов (б), определяющих развитие цепного механизма воспламенения при низкой ($T_0 = 730$ К) и высокой ($T_0 = 1200$ К) начальной температурах в стехиометрической смеси *изо*- C_8H_{18} + воздух с $p_0 = 4$ МПа. Эти зависимости иллюстрируют различия в накоплении активных радикалов для высоко- и низкотемпературного механизмов окисления.

При $T_0 < 850$ К наработка активных атомов и радикалов идет через формирование пероксидов и гидропероксидов: концентрации $C_8H_{17}O_2$ и $C_8H_{16}OH$ при $T_0 = 730$ К (рис. 3, б) в $10^3 \div 10^4$ раз выше, чем при $T_0 = 1200$ К (см. рис. 4, б). Развитие процесса по низкотемпературному механизму окисления *изо*- C_8H_{18} приводит к появлению «предвестника» воспламенения — резкому увеличению концентрации тяжелых и легких углеводородных радикалов, а также атомов O , H и радикалов OH , HO_2 . При этом увеличение содержания углеводородных радикалов в смеси сопровождается некоторым ростом температуры. Рост концентраций активных частиц замедляется и приостанавливается в момент времени $t = 10^{-3}$ с. При этом концентрации $C_8H_{17}O_2$ и $C_8H_{16}OON$ начинают резко уменьшаться. Концентрация активных центров — носителей цепного механизма процесса: O , H , OH , CH_3 , C_2H_5 —

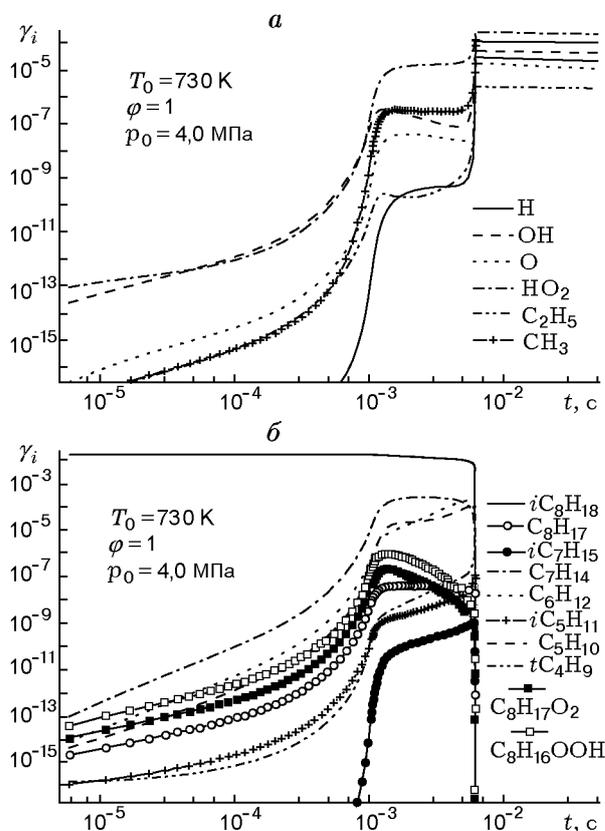


Рис. 3. Изменение концентраций важнейших углеводородных радикалов, а также атомов O , H и радикалов OH , HO_2 , CH_3 , C_2H_5 , инициирующих воспламенение смеси *изо*- C_8H_{18} + воздух, при низкой температуре

составляет при этом всего 10^{-5} и недостаточна для реализации воспламенения. Далее процесс развивается следующим образом. Содержание тяжелых углеводородных радикалов C_8H_{17} , $C_8H_{17}O_2$, C_7H_{14} , C_8H_{16} , $C_8H_{16}OON$ начинает уменьшаться, а легких радикалов CH_3 , HO_2 , C_2H_5 , атомов H и алкилов C_7H_{15} , C_5H_{11} , C_4H_9 медленно расти, что приводит при $t = 6 \cdot 10^{-3}$ с к воспламенению смеси.

При $T_0 = 1200$ К вследствие того, что основными реакциями зарождения цепи служат реакции диссоциации *изо*- C_8H_{18} и C_8H_{17} , практически на протяжении всего периода индукции ($0 < t < 10^{-4}$ с) наблюдается постепенное увеличение концентраций как тяжелых, так и легких радикалов и атомов. При высоких начальных температурах наибольшие концентрации тяжелых углеводородных радикалов в период индукции характерны для C_5H_{10} и C_6H_{12} , поскольку они являются основны-

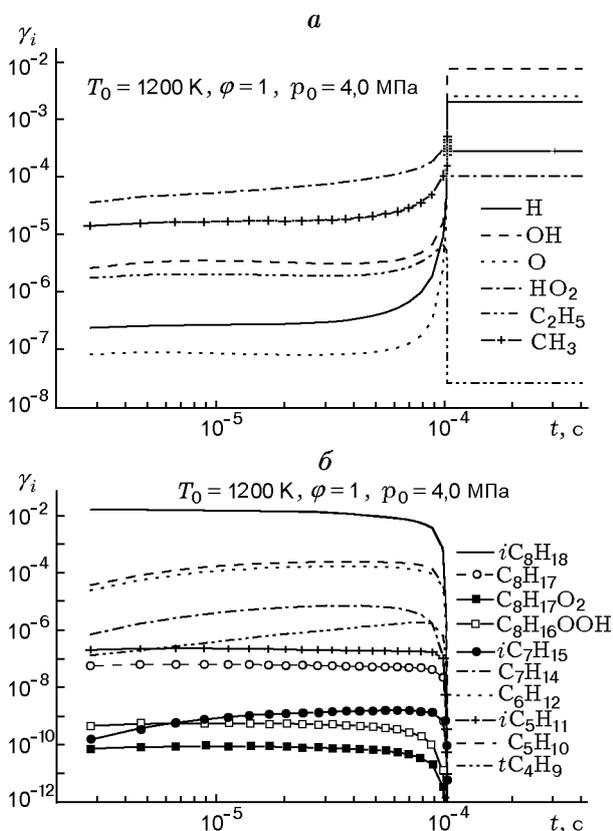
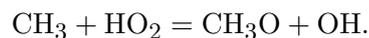


Рис. 4. Изменение концентраций важнейших углеводородных радикалов, а также атомов О, Н и радикалов ОН, НО₂, СН₃, С₂Н₅, инициирующих воспламенение смеси *изо*-С₈Н₁₈ + воздух, при высокой температуре

ми продуктами распада алкильных радикалов С₈Н₁₇, С₆Н₁₃, С₅Н₁₁. Для низких начальных температур при $t < \tau_{ind}$ основным тяжелым углеводородом является С₇Н₁₄. Концентрация С₆Н₁₂ в этом случае существенно меньше и близка к концентрации С₈Н₁₇. Отличие наблюдается и в концентрациях легких активных радикалов. Так, при $T_0 = 1200$ К наибольшие значения γ_i наблюдаются для НО₂ и СН₃, а при $T_0 = 730$ К — для НО₂ и ОН (хотя общая концентрация активных легких радикалов в этом случае даже в конце периода индукции в 10 раз меньше, чем при высоких значениях T_0). При этом если для высоких начальных температур характер изменения концентраций всех легких радикалов практически одинаков, то для низких температур изменение концентрации $\gamma_{ОН}$ в период индукции происходит интенсивнее, чем для других легких компонентов.

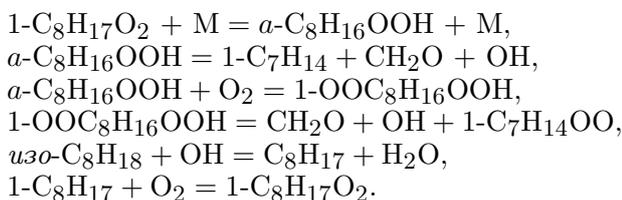
Проанализируем особенности окисления изооктана при высоких и низких началь-

ных температурах. Очевидно, что для любых начальных параметров реакциями зарождения цепи будут реакции окисления исходного топлива (реакции 19–21) и мономолекулярного распада (реакции 1–5). Здесь и далее номера реакций соответствует нумерации в табл. 1. При этом образуется значительное количество С₈Н₁₇ (его изомеры). Поэтому дальнейшее развитие цепного процесса в значительной степени зависит от того, как пойдет разложение С₈Н₁₇. Анализ показывает, что при высоких значениях T_0 потребление С₈Н₁₇ (86 %) происходит через реакции распада (38–62), а при низких — через реакции образования пероксидов С₈Н₁₇О₂ (67, 85, 89, 93). При высоких начальных температурах основными реакциями продолжения цепи после образования первых радикалов С₈Н₁₇, *изо*-С₇Н₁₅, *транс*-С₄Н₉, *изо*-С₄Н₉, *изо*-С₃Н₇, СН₃, Н являются реакции взаимодействия изооктана с СН₃, в которых образуются изомеры С₈Н₁₇ (реакции 26–29). Прямая наработка Н (реакции 4, 5) и последующий распад алкильных радикалов С_{2n}Н_{2n-1} увеличивают концентрацию активных атомов Н, О и легких радикалов ОН, СН₃, С₂Н₅, что ведет к интенсификации цепных реакций. Кроме того, при высоких значениях T_0 возрастает роль реакции взаимодействия метильного радикала СН₃ с НО₂ с образованием более активного радикала ОН:



При низких начальных температурах для развития процесса воспламенения особенно существенно увеличение концентрации гидроксила. В силу очень низкой энергии активации реакция *изо*-С₈Н₁₈ + ОН = С₈Н₁₇ + Н₂О становится основным каналом (86 % для $T_0 = 730$ К и 59 % для $T_0 = 850$ К) потребления *изо*-С₈Н₁₈ и образования С₈Н₁₇. Если для высоких температур основной реакцией образования ОН является реакция Н + О₂ = ОН + О, то для низкотемпературного режима ($T_0 = 600 \div 850$ К) образование активных радикалов ОН происходит в основном при распаде пероксильного радикала С₈Н₁₇ОО (реакции 71, 72, 74).

Увеличение концентрации ОН приводит к ускорению образования С₈Н₁₇ по реакциям 14–17 и образования С₈Н₁₇О₂ по реакции 67, т. е. при низких значениях T_0 цепной механизм образования ОН реализуется через следующие реакции:



В этом случае радикалы HO_2 , образующиеся в реакциях 18–21, достаточно быстро рекомбинируют, формируя пассивный H_2O_2 , и не играют заметной роли в образовании активных радикалов. Дальнейшее развитие процесса идет в основном через реакции 137–140 и 148–154 с участием $1-C_7H_{14}$, $3-C_7H_{14}$. Такие продукты распада, как *изо-С₈Н₁₈*, C_8H_{17} и *изо-С₈Н₁₆*, *изо-С₅Н₁₁*, *транс-С₄Н₉*, при низких значениях T_0 практически отсутствуют в начале периода индукции (см. рис. 3). В то же время концентрация C_5H_{10} , образующегося в реакциях 150, 154, 162, 166 при взаимодействии $1-C_7H_{14}$ и $3-C_7H_{14}$ с O и OH , велика как для низких, так и для высоких температур T_0 (см. рис. 3, 4). Последующие реакции взаимодействия олефинов с легкими радикалами и тем более энергоемкий распад алкенов мало влияют на процесс воспламенения при низких температурах.

В диапазоне средних температур основными процессами потребления изооктана остаются реакции взаимодействия *изо-С₈Н₁₈* с OH , но при этом увеличивается вклад реакций взаимодействия *изо-С₈Н₁₈* с O и реакций разложения *изо-С₈Н₁₈*. Разветвление цепи идет преимущественно через распад C_8H_{17} . При этом образуются $1-C_6H_{12}$, *изо-С₆Н₁₃*, *изо-С₅Н₁₁*, а также легкие углеводороды.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный реакционный механизм окисления изооктана позволяет правильно описать зависимость времени задержки воспламенения от температуры в широком диапазоне изменения T_0 , p_0 и состава смеси *изо-С₈Н₁₈* + воздух. Проведенный анализ показал, что кинетические механизмы воспламенения изооктана при низких ($T_0 < 850$ К) и высоких ($T_0 > 850$ К) температурах существенно различаются. При низких значениях T_0 основной реакцией инициирования цепного механизма горения является реакция окисления алкильного радикала C_8H_{17} при взаимодействии с O_2 . При этом образование активных радикалов OH происходит в основном через последовательность реакций разложения алкилпероксида $C_8H_{17}O_2$

и гидропероксиалкила $C_8H_{16}OOH$. При высоких значениях T_0 за инициирование цепного механизма воспламенения ответственны в основном реакции мономолекулярного распада *изо-С₈Н₁₈*, в которых образуются свободные радикалы CH_3 , C_3H_7 , атомы H и алкильный радикал C_8H_{17} (его изомеры 1-, 2-, 3-, 4-). Распад изомеров C_8H_{17} является реакцией продолжения цепи в механизме воспламенения. Основным каналом образования радикалов OH в этом случае служит реакция взаимодействия атомов H с молекулярным кислородом, приводящая к разветвлению цепи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Westbrook C. K., Dryer F. L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Prog. Energy Combust. Sci. 1984. V. 10. P. 1–57.
2. Cox R. A., Cole J. A. Chemical aspects of the autoignition of hydrocarbon — air mixtures // Combust. Flame. 1985. V. 60, N 2. P. 109–123.
3. Pitz W. J., Westbrook A. Comprehensive chemical kinetic reaction mechanism of the oxidation of *n*-butane // 20 Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Inst., 1985. P. 831–843.
4. Axelsson E. I., Brezinsky K., Dryer F. L., et al. Chemical kinetic modeling of the oxidation of large alkane fuels: *n*-octane and iso-octane // 21 Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Inst., 1986. P. 783–793.
5. Axelsson E. I., Brezinsky K., Dryer F. L., et al. A detailed chemical kinetic reaction mechanism for oxidation of *n*-octane and iso-octane // Lawrence Livermore National Laboratory. Report UCRL-94449. 1986.
6. Westbrook C. K., Pitz W. J., Thornton M. M., and Malte P. C. A kinetic study of *n*-pentane oxidation in a well-stirred reactor // Combust. Flame. 1988. V. 72, N 1. P. 45–62.
7. Chakir A., Cathonnet M., Boettner J. C., Gaillard F. Kinetic study of *n*-butane oxidation // Combust. Sci. Technol. 1989. V. 65. P. 207–230.
8. Kogima S. Detailed modeling of *n*-butane autoignition chemistry // Combust. Flame. 1994. V. 99, N 1. P. 87–136.
9. Басевич В. Я., Фролов С. М. Сокращенная кинетическая схема для моделирования самовоспламенения воздушных смесей изооктана и *n*-гептана в течение периода индукции применительно к двигателям внутреннего сгорания // Хим. физика. 1994. Т. 13, № 8–9. С. 146–156.
10. Chakir A., Bellimam M., Boettner J. C., et al. Kinetic study of *n*-heptane oxidation // Intern. J. Chem. Kinet. 1992. V. 24. P. 385–410.

11. **Zhang H. Y., McKinnon J. T.** Elementary reaction modeling of high-temperature benzene combustion // *Combust. Sci. Technol.* 1995. V. 107. P. 261–300.
12. **Ranzi E., Gaffuri P., Faravelli T., Dagaut P.** A wide range modeling study of n-heptane oxidation // *Combust. Flame.* 1995. V. 103, N 1/2. P. 91–106.
13. **Linstedt R. P., Maurice L. Q.** Detailed kinetic modelling of n-heptane combustion // *Combust. Sci. Technol.* 1995. V. 107. P. 317–353.
14. **Westbrook C. K., Pitz W. J., Curran H. J., Gaffuri P.** A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation // *Combust. Flame.* 1998. V. 114, N 1–2. P. 149–177.
15. **Moses E., Yarin A. L., Bar-Yoseph P.** On knocking prediction in spark ignition engines // *Combust. Flame.* 1995. V. 101, N 3. P. 239–261.
16. **Ranzi E., Faravelli T., Gaffuri P., et al.** A wide range modeling study of iso-octane oxidation // *Combust. Flame.* 1997. V. 108, N 1/2. P. 24–42.
17. **Старик А. М., Титова Н. С., Яновский Л. С.** Особенности кинетики окисления продуктов термического разложения C_3H_8 и $n-C_4H_{10}$ в смеси с воздухом // *Кинетика и катализ.* 1999. Т. 40, № 1. С. 11–26.
18. **Doolan K. R., Mackie J. C.** Kinetics of pyrolysis of octane in argon-hydrogen mixtures // *Combust. Flame.* 1983. V. 50, N 1. P. 29–39.
19. **Warnatz J.** Chemistry of high temperature combustion of alkanes up to octane // 20 Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Inst., 1985. P. 844–853.
20. **Chakir A., Bellimam M., Cathonner M.** Kinetic study of n-butane oxidation // *Combust. Sci. Technol.* 1991. V. 77. P. 239–260.
21. **Baulch D. L., Cobos G. J., Cox R. A., et al.** Evaluated kinetic data for combustion modeling. Supplement I // *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 1994. V. 23, N 6. P. 847–1033.
22. **Leung K. M., Lindstedt R. P.** Detailed kinetic modeling of C_1 – C_3 alkane diffusion flames // *Combust. Flame.* 1995. V. 102, N 1–2. P. 129–168.
23. **Burcat and McBride B.** Ideal gas thermodynamic data for combustion and air-pollution Use // *Technion Aerospace Engineering (TAE) Report.* N 804. June 1997.
24. **Жоров Ю. М.** Кинетика промышленных органических соединений: Справочник. М.: Химия, 1985.
25. **Lay T. H., Bozzelli J. W.** Enthalpies of formation and group additivity of alkyl peroxides and trioxides // *J. Phys. Chem.* 1997. V. 101. P. 9505–9510.
26. **Fieweger K., Blumenthal R., Adomeit G.** Self-ignition of S.I. engine model fuels: a shock tube investigation at high pressure // *Combust. Flame.* 1997. V. 109, N 4. P. 599–619.
27. **Крюков В. С., Наумов В. И., Демин А. В. и др.** Горение и течение в агрегатах энергоустановок: Моделирование, энергетика, экология. М.: Янус-К, 1997. С. 304.
28. **Sloane T. M.** Ignition and flame propagation modeling with an improved methane oxidation mechanism // *Combust. Sci. Technol.* 1989. V. 68. P. 287–313.

*Поступила в редакцию 2/XI 2002 г.,
в окончательном варианте — 9/IX 2003 г.*