

## О ТЕРМИНЕ «ЗАКОН ЭКСПОНЕНТЫ В ПОЛОЖИТЕЛЬНОЙ ЭКСПОНЕНТЕ», КОТОРЫЙ ВВЕДЕН В НАУЧНУЮ ЛИТЕРАТУРУ ДЛЯ ОБЪЯСНЕНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРОТЕКАНИЯ РАЗВЕТВЛЕННЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ГАЗОВЫХ СМЕСЯХ

А. А. Беляев<sup>1</sup>, И. С. Гордополова<sup>2</sup>, Б. С. Ермолаев<sup>3</sup>

**Аннотация:** Термин «закон экспоненты в положительной экспоненте» был введен и многократно использовался В. В. Азатыаном в его публикациях для объяснения особенностей протекания разветвленных цепных реакций в газовых смесях. Математической основой закона служит формула для скорости потребления кислорода, которая была получена частичным интегрированием упрощенной схемы кинетических уравнений, записанной по методу квазистационарных концентраций для смесей водород + кислород. Экспрессивный вид формулы, которую при некоторых допущениях можно записать в виде экспоненты в экспоненте, рассматривался в работах В. В. Азатыана как проявление особо сильной температурной зависимости скорости цепных газовых реакций. Однако в данной статье показано, что сама по себе формула позволяет анализировать лишь изотермический случай, когда можно в явном виде взять входящий в нее интеграл по времени. Чтобы рассмотреть температурную зависимость скорости превращения, нужна дополнительная информация в виде производной температуры по времени. В качестве такой информации в статье использованы результаты расчетов по самовоспламенению в адиабатическом реакторе стехиометрической смеси водород + воздух с детальным кинетическим механизмом. Показано, что результаты кинетических расчетов температурной зависимости скорости потребления кислорода при самовоспламенении не совпадают с оценками, сделанными с помощью формулы, предложенной В. В. Азатыаном. Дано объяснение причин расхождения. В целом, расчеты не подтверждают существование «закона экспоненты в положительной экспоненте». В научной и учебной литературе этим термином следует пользоваться с осторожностью.

**Ключевые слова:** экспоненциальная зависимость от температуры; закон Аррениуса; химические реакции в газовых смесях; разветвленные цепные реакции

DOI: 10.30826/CE23160402

EDN: AXSJYW

### Литература

1. Азатыан В. В. Температурная зависимость скорости разветвленно-цепных реакций // Кинетика и катализ, 1976. Т. 17. № 2. С. 533.
2. Азатыан В. В. Цепные реакции в процессах горения, взрыва и детонации газов. — Черноголовка: Изд-во РАН, 2017. 448 с.
3. Азатыан В. В. Цепные реакции горения, взрыва и детонации в газах. Химические методы управления. — М.: Изд-во РАН, 2020. 360 с.
4. Азатыан В. В. Особенности физико-химических механизмов и кинетических закономерностей горения, взрыва и детонации газов // Кинетика и катализ, 2020. Т. 61. № 3. С. 291–311. doi: 10.31857/S0453881120030041.
5. Азатыан В. В. Механизм и кинетические законы реакций, определяющие распространение пламени, взрыв и детонацию газов // Кинетика и катализ, 2023. Т. 64. № 3. С. 251–266. doi: 10.31857/S0453881123030024.
6. ANSYS Academic Research CFD. CHEMKIN-Pro 15112. — San Diego, CA, USA: Reaction Design, 2011. CK-TUT-10112-1112-UG-1.
7. NUIGMech1.1. National University of Ireland Galway, 2020. <https://www.universityofgalway.ie/combustionchemistrycentre/mechanismdownloads/>.

Поступила в редакцию 15.06.2023

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevIHF@yandex.ru

<sup>2</sup>Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А. Г. Мерджанова Российской академии наук, gisochka@yandex.ru

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, boris.ermolaev@mail.ru