**Изучение химии образования положительных ионов**

**в пламени диметилового эфира: эксперимент и численное моделирование**

***Черепанов А.В.***

*Магистрант, 1 год обучения*

*Новосибирский государственный университет,*

*физический факультет, Новосибирск, Россия*

*E-mail: a.cherepanov1@g.nsu.ru*

Пламя представляет собой слабо ионизированную плазму. Детальное изучение процессов образования и взаимодействия заряженных частиц имеет важное значение для развития и создания новых методов диагностики и ионно-чувствительных технологий для управления процессами горения.

В основу представленных в литературе кинетических механизмов горения углеводородов с участием заряженных частиц заложены реакции хемиионизации, реакции образования гидроксония, реакции передачи протона и электрона нейтральным частицам. Однако эти механизмы несовершенны в связи с отсутствием надежных экспериментальных данных, на которых можно провести их проверку. Целью данной работы являлось получение таких данных, их сопоставление с результатами моделирования и, при необходимости, усовершенствование механизмов.

В данной работе методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии измерено пространственное распределение положительных ионов (катионная структура) в пламени предварительно перемешанной смеси диметиловый эфир/кислород/аргон в широком диапазоне коэффициентов избытка горючего ϕ = 0.5–1.5, стабилизированном на плоской горелке при атмосферном давлении. Выбор диметилового эфира в качестве топлива обусловлен экологическими соображениями. Также были проведены численные расчеты катионной структуры пламени с применением программного обеспечения Cantera 3.0 [1]. Для расчётов использован детальный кинетический механизм, включающий реакции с участием заряженных частиц, построенный на основе доступных в литературе моделей и дополненный реакциями для катионов C2H3+, CH3O+, [H3COCH3]H+, термохимические данные которых были рассчитаны высокоточными методами квантовой химии (CCSD(T)-F12). Кроме того, было изучено влияние двух различных (никелевого и палладиевого) пробоотборников на пространственное распределение катионов и их гидратов в пламени. На основе сопоставления данных эксперимента и моделирования было установлено, что предложенный механизм корректно описывает относительное содержание ключевых кислородсодержащих катионов (CH5O+, C2H3O+), а также катионов с общей формулой CxHy+. Полученные данные послужат основой для дальнейшего усовершенствования механизма превращения ионов в пламенах углеводородов.

**Литература**

1. Goodwin D. G., Moffat H. K., Speth R. L. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. – 2018.