**Изучение химии образования положительных ионов в пламени аммиака и водорода**

***Черепанов А.В.***

*Студент, 2 курс магистратуры,*

*Новосибирский государственный университет,  
физический факультет, Новосибирск, Россия*

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

Изучение пламени как слабо ионизированной плазмы и механизмов взаимодействия заряженных частиц важно для разработки новых методов анализа и управления процессами горения. В последнее время пламёна аммиака стали представлять особый интерес благодаря возможности сокращения выбросов углекислого газа при сжигании и простым технологиям производства, хранения и транспортировки. Однако в пламёнах аммиака ионная химия слабо изучена и в литературе практически отсутствуют данные по ионной структуре данных пламён. Для описания процессов образования заряженных частиц в пламёнах аммиака с водородом необходимо получить экспериментальные данные по ионной структуре пламени, которые могут быть описаны одномерной моделью.

Целью данной работы являлось получение таких данных и разработка химико-кинетического механизма на их основе. В данной работе методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии измерено пространственное распределение положительных ионов (катионная структура) в пламени предварительно перемешанной смеси аммиак/водород/кислород/аргон в диапазоне коэффициентов избытка горючего ϕ=0.8÷1.2, стабилизированном на плоской горелке при атмосферном давлении. На основе нейтрального механизма для пламени аммиак/водород и полученных экспериментальных данных и данных, взятых из литературы по ионной структуре, был разработан химико-кинетический механизм с участием заряженных частиц. Для ионного механизма были рассчитаны высокоточными методами квантовой химии W2-F12 термохимические данные, а химические реакции были взяты из астрохимических баз данных и литературы.

Используя полученную модель ионной химии, были проведены численные расчеты катионной структуры пламен с применением программного обеспечения Cantera 2.6 [1]. На основе сравнения данных эксперимента и моделирования было установлено, что предложенный механизм корректно описывает относительное содержание ключевых катионов (NH4+, H3O+). Полученные данные и разработанный механизм послужат основой для дальнейшего усовершенствования ионного механизма в пламенах аммиака.

**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.