<U3UUSUՆԻ <UՆՐԱՊԵՏՈԻԹՅԱՆ ԳԻՏՈԻԹՅՈԻՆՆԵՐԻ</td> U2QU3ԻՆ U4UԴԵՄԻU НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ АРМЕНИЯ NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF ARMENIA

 Հшյшилшић рћићшиш ћшилћи

 Химический журнал Армении
 77, № 1, 2024
 Chemical Journal of Armenia

DOI: 10.54503/0515-9628-2024.77.1-21

О ВЛИЯНИИ СЕРНИСТОГО ГАЗА НА КИНЕТИКУ ЦЕПНОЙ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ВОДОРОДА

Э.М. МАКАРЯН*, А.А. АРУТЮНЯН

Институт химической физики им. А.Б. Налбандяна НАН РА 0014, Ереван, ул. П. Севака, 5/2, E- mail:makaryan@mail.ru

Поступило 23.02.2024

Изучено влияние сернистого газа на процесс окисления водорода. Показано, что реакция окисления водорода в присутствии сернистого газа в области самовоспламенения при определённых условиях (давление, температура, состав газовой смеси, время контакта) протекает в колебательном режиме и сопровождается светоизлучением. Показано, что сернистый газ в малых количествах и при пониженных температурах (700 *K* - 900 *K*) оказывает значительное ускоряющее воздействие на процесс окисления водорода. По кинетическим кривым расхода кислорода для разных температур, которые были получены расчётным путём, определено значение эффективной энергии активации для процесса в целом. Сопоставление экспериментальных данных, полученных при окислении водорода в присутствии сернистого газа с результатами расчётов предлагаемой модели исследуемого процесса, показало хорошее совпадение. Выяснено, что процесс окисления водорода в присутствии сернистого газа протекает по вырождено-цепному механизму и существенную роль в протекании процесса играет первичный продукт превращения сернистого газа – закись серы (SO).

Библ. ссылок 30, рис. 8, табл. 3.

Ключевые слова: окисление водорода, сернистый ангидрид, сера, светоизлучение.

введение

В настоящее время весьма актуальной является проблема утилизации сернистого газа, выбрасываемого в атмосферу с отходящими газами теплоёмких производств. В работах [1-3] показано, что в процессе горения водород-кислородных смесей, добавки сернистого газа подвергаются химическому превращению с образованием серы. Необходимо также отметить, что сернистый газ в процессе горения водородкислородных смесей, подвергаясь химическому превращению, одновременно оказывает влияние на динамику процесса, и, в зависимости от условий протекания процесса, может оказывать как промотирующее, так и ингибирующее влияние [4-6].

При определенных давлениях, температурах и скоростях прохождения газовой смеси через реактор возникает новое явление: процесс низкотемпературного горения из режима непрерывного пламени переходит в колебательный режим, характеризующийся последовательными световыми вспышками определенной частоты и интенсивности [7, 8].

Данная работа посвящена изучению химического превращения диоксида серы с образованием элементарной серы в режиме низкотемпературного горения богатой водород-кислородной смеси с добавкой сернистого газа. Процесс окисления водорода в присутствии сернистого газа изучали в колебательном режиме. Специально разработанная методика позволяла регистрировать светоизлучение и анализировать данные по интенсивности, частоте и динамике вспышек, которыми сопровождалось химическое превращение в колебательном режиме, и эти данные сопоставляли с результатами, полученными расчётным путём. Соответствие экспериментальных данных и результатов расчетов позволило применить метод численного моделирования для более подробного анализа кинетики и механизма изучаемого процесса.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Эксперименты проводили на вакуумной проточной установке, схема которой приведена на рис. 1. В качестве реактора использовали кварцевый цилиндр (d=80 мм, l=230 мм). Смесь реагирующих газов готовили в стеклянных баллонах (12), присоединённых к коллектору (14), откуда она под нужным давлением подавалась в реактор (1). Скорость газового потока и давление регулировали с помощью вентилей (16), установленных на входе и выходе реактора. Давление в реакторе измеряли ртутным манометром (15).Реактор подогревался электропечью (3) специальной конструкции. В боковой стенке и на торце печи имелись смотровые окна (2) для визуальных наблюдений и датчик (7) для регистрации вспышек светочувствительным приёмником.



Рис. 1. 1– кварцевый реактор, 2– смотровое окно, 3– электронагреватель, 4– термопара, 5- терморегулятор, 6- регистратор температуры, 7- датчик для регистрации светоизлучения, 8- регистратор светоизлучения, 9- электронный преобразователь, 10электронный осциллограф «S-Recorder-2», 11- персональный компьютер, 12- баллоны для составления и хранения реагирующей газовой смеси, 13- вакуумные краны, 14коллектор, 15- ртутные манометры, 16- вентили для регулировки давления в реакторе, 17- ловушка, охлаждаемая жидким азотом, 18- вакуумный насос.

Для получения воспроизводимых данных, перед проведением измерений производили очистку внутренней поверхности реактора. С этой целью реактор при температуре $1000 \mathcal{C}$ продувался кислородом в течение часа. Светоизлучение регистрировалось преобразователем и цифровым многоканальным самописцем «S-Recorder-2», подсоединённым к компьютеру, что позволяло проводить визуальные наблюдения и регистрацию.

Анализ влияния SO₂ на процесс окислительного превращения водорода проводился методом численного моделирования с помощью программы SENKIN:CHEMKIN II [9] для условий (давление, температура, состав газовой смеси, время контакта), при которых изучали колебательный процесс. Опыты проводили со смесью богатой водородом с добавкой сернистого газа: H₂:O₂:SO₂:N₂=10:1:1:0.5, при температурах 743, 763 и 783 *K*, давлении P₀ = 30 *Торр* и времени контакта τ = 0.9 *c*.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Экспериментальные данные по изучению процесса окисления водорода в колебательном режиме, полученные фиксацией и последующей компьютерной записью светоизлучения при различных температурах (743,



763 и 783 *K*), давлении P=30 *Торр* и времени контакта τ = 0.9 с, представлены на рис. 2.

Основные характеристики светоизлучения, наблюдаемого в процессе окисления водорода с добавками сернистого газа, сведены в табл. 1.

Таблица 1

Влияние температуры на интенсивность, частоту и период колебаний в процессе окисления водорода с добавками сернистого газа

| T, K | I, относительные единицы | v, c ⁻¹ | период колебаний, <i>с</i> эксперимент | период индукции, <i>с</i> расчёт |
|---------|--------------------------|--------------------|---|--|
| 743 | 0.20 | 2 | 0.51 | 0.49 |
| 763 | 0.09 | 3 | 0.33 | 0,34 |
| 783 | 0.05 | 4 | 0.24 | 0,22 |

Как видно из табл. 1, периоды колебаний в эксперименте и в расчётах очень близки, и с увеличением температуры наблюдается увеличение частоты вспышек и уменьшение их интенсивности, что объясняется уменьшением времени индукции процесса и уменьшением минимального количества газовой смеси, обеспечивающей протекание колебательного процесса.

Рис. 2. Изменение интенсивности светоизлучения во времени при температурах 743, 763 и 783 *K*, давлении P = 30 *Торр* и времени контакта т = 0.9 *c*.

Таблица 2

| | Реакции | $k = AT^{n}exp(-E/RT)$ | | | Литера- |
|----|---|------------------------------------|-------|-------------|---------|
| № | | А, моль-см-с-К | n | Е, кал/моль | тура |
| 1 | H₂+O₂→2OH | 7.95 ·10 ¹⁴ | 0.0 | 44950.0 | 10 |
| 2 | OH+H2→H2O+H | $2.20 \cdot 10^{13}$ | 0.0 | 5140.0 | 11 |
| 3 | H+O ₂ →OH+O | 9.75 [.] 10 ¹³ | 0.0 | 14850.0 | 12 |
| 4 | O+H2→OH+H | $4.78 \cdot 10^4$ | 2.67 | 6290.0 | 13 |
| 5 | $H+O_2+M \rightarrow HO_2+M$ | 1.10 .1015 | 0.0 | 0.0 | 14 |
| 6 | $HO_2+HO_2 \rightarrow H_2O_2+O_2$ | 2.00. 1012 | 0.0 | 0.0 | 15 |
| 7 | H ₂ O ₂ →OH+OH | 3.00.1014 | 0.0 | 50700.0 | 13 |
| 8 | $H_2O_2+M \rightarrow OH+OH+M$ | 1.21.1017 | 0.0 | 47500.0 | 13 |
| 9 | H+SO ₂ →SO+OH | 1.35.1022 | -2.30 | 30965.0 | 16 |
| 10 | H+SO ₂ →HSO ₂ | 5.31·10 ⁸ | 1.59 | 2470.0 | 16 |
| 11 | H+SO ₂ →HOSO | 2.33·10 ⁸ | 1.63 | 7300.0 | 16 |
| 12 | HSO ₂ +M→SO+OH+M | 3.01.1022 | 0.0 | 0.0 | 17 |
| 13 | HOSO→OH+SO | 1.66.1016 | -0,32 | 67724.0 | 18 |
| 14 | $SO+SO \rightarrow S+SO_2$ | 1.21.1011 | 0.0 | 0.0 | 19 |
| 15 | SO+O→S+O ₂ | $2.05 \cdot 10^{13}$ | 0.0 | 14150.0 | 20 |
| 16 | SO+O+M→SO ₂ +M | 1.81.1017 | 0.0 | 0.0 | 21 |
| 17 | S+O ₂ →SO+O | 5.18·10 ⁴ | 2.4 | -1907.0 | 22 |
| 18 | SO+O ₂ →SO ₂ +O | 9.63·10 ¹⁰ | 0.0 | 4531.0 | 23 |
| 19 | S+SO ₂ →SO+SO | 5.88·10 ¹² | 0.0 | 9034.0 | 24 |
| 20 | $S+S+M \rightarrow S_2+M$ | 7.18·10 ¹⁴ | 0.0 | -407.0 | 25 |
| 21 | SO ₂ +O→SO+O ₂ | 5.00·10 ¹² | 0.0 | 19460.0 | 21 |
| 22 | H+HSO ₂ →H ₂ +SO ₂ | $1.57 \cdot 10^{12}$ | 0.0 | 0.0 | 26 |
| 23 | $OH+HSO_2 \rightarrow H_2O+SO_2$ | 4.58·10 ¹² | 0.0 | 0.0 | 26 |
| 24 | SO2+O+M→SO3+M | $3.45 \cdot 10^{25}$ | -3.0 | 4765.0 | 27 |
| 25 | SO3+SO→SO2+SO2 | 1.27.107 | 0.0 | 0.0 | 28 |
| 26 | H→0.5 H ₂ | $2.50 \cdot 10^3$ | 0.0 | 0.0 | 1 |
| 27 | $OH+H+M \rightarrow H_2O+M$ | $3.27 \cdot 10^{13}$ | 0.0 | 0.0 | 1 |
| 28 | O→0.5 O ₂ | $3.10 \cdot 10^3$ | 0.0 | 0.0 | |

Набор основных элементарных реакций, характеризующих окислительное превращение водорода с добавками диоксида серы

Вследствие малых времен протекания процесса экспериментально получить данные по кинетике расхода исходных реагентов и накопления продуктов реакции не представляется возможным, поэтому была

предпринята попытка сделать это методом численного моделирования с использованием компьютерной программы SENKIN:CHEMKIN II.

Изучение кинетики окислительного превращения водорода в колебательном режиме и анализ влияния сернистого газа на этот процесс проводили при условиях, соответствующих появлению световых вспышек, с использованием модели, включающей элементарные реакции, представленные в табл. 2.

Рассматриваемая модель включала элементарные реакции процесса окислительного превращения водорода в присутствии SO₂, а именно реакции зарождения, продолжения, разветвления и гибели цепей. Расчеты данной модели для состава исходной газовой смеси $H_2:O_2:SO_2:N_2=10:1:1:0.5$, в температурном интервале 700 *K* – 900 *K* и давления $P_0=30$ *Торр* показали заметное ускорение процесса, что соответствует экспериментальным данным.

Зависимости изменения концентрации кислорода и некоторых продуктов реакции в реакторе от времени при различных температурах представлены на рис. 3-5. В правом верхнем углу рисунков 3-5 представлены записи светоизлучения, наблюдаемого во время процесса окисления водорода в присутствии сернистого газа, полученные с помощью цифрового многоканального самописца «S-Recorder-2».



Рис. 3. Кинетические кривые расхода кислорода, а также накопления S и S₂ в процессе окисления водорода в присутствии SO₂. Т = 743 *K*, P = 30 *Торр.*



Рис. 4. Кинетические кривые расхода кислорода, а также накопления S и S₂ в процессе окисления водорода в присутствии SO₂. Т = 763 *K*, P = 30 *Торр.*



Рис. 5. Кинетические кривые расхода кислорода, а также накопления S и S₂ в процессе окисления водорода в присутствии SO₂. T=783*K*, P=30 *Торр*.

Сравнение периода колебаний светоизлучения и времени полного расхода кислорода в реакционной среде на рис. 3-5 показывает, что они в каждом из трёх случаев совпадают. Этот факт говорит о том, что результаты расчётов, выполненных с использованием, представленной модели процесса окисления водорода в присутствии сернистого газа, хорошо согласуются с экспериментальными данными. Следовательно, модель, представленная в табл. 2, может быть успешно применена для анализа процесса окисления водорода в присутствии сернистого газа при повышенных температурах, давлениях и различных соотношениях реагентов. Так, используя расчетные данные по изменению концентрации сернистого газа от времени в интервале температур 700–1300 *K*, были рассчитаны максимальные скорости процесса превращения сернистого газа для указанного температурного интервала, и они представлены в таблице 3.

Таблица 3

| превращения серинстого газа от температуры | | | | | | | | | |
|--|-------------|---------------------------|---------|------------------|--|--|--|--|--|
| N⁰ | T, <i>K</i> | W, моль/см ³ с | lgW | 1/T, <i>K</i> -1 | | | | | |
| 4 | 700 | 0,780404E-6 | -5,1057 | 1.4286 E-3 | | | | | |
| 5 | 750 | 0,83524 E-6 | -5,0765 | 1.3333 E-3 | | | | | |
| 6 | 800 | 0,92890 E-6 | -5,0321 | 1.2500 E-3 | | | | | |
| 7 | 850 | 0,98618 E-6 | -5,0060 | 1.1764 E-3 | | | | | |
| 8 | 900 | 1,07897 E-5 | -4,9670 | 1.1111 E-3 | | | | | |
| 9 | 1000 | 1,22441E-5 | -4,9121 | 1.0000 E-3 | | | | | |
| 10 | 1100 | 1,34513 E-5 | -4,8712 | 0.9091 E-3 | | | | | |
| 11 | 1200 | 1,45242 E-5 | -4,8379 | 0.8333 E-3 | | | | | |
| 12 | 1300 | 1,64239 E-5 | -4,7845 | 0.7692 E-3 | | | | | |

Зависимость максимальной скорости певращения сернистого газа от температуры

Приняв, что скорость реакции пропорциональна константе скорости, рассчитанной при одинаковых концентрациях кислорода 0.5Е-9 *моль/см³* в области, которой наблюдается максимальная скорость, построили графическую зависимость логарифмической формы уравнения Аррениуса. Зависимость lgW - 1/Т представлена на рис. 6.



Рис. 6. Зависимость логарифма максимальной скорости процесса, определяемой по расходу кислорода от обратной температуры.

Как видно из рис. 6, данная зависимость подчиняется линейному закону. По тангенсу угла наклона было рассчитано значение эффективной энергии активации процесса, которая оказалась равной 2200 кал/моль.

Анализ расчетных данных (рис. 7) по изучению влияния количества сернистого газа, замещающего инертный газ азот в водородкислородной смеси, на кинетику процесса, показал, что ускоряющее влияние более заметно при его малых количествах и при более низких температурах.



Рис. 7. Зависимость времени 99% расхода кислорода (*t*_{кон}) от величины n-части сернистого газа, замещающего инертный газ азот в газовой смеси H₂:O₂:SO₂:N₂=10:1: n:(1.5- n). 1-743, 2-763, 3-783 *K*.

Интересно было также проследить изменение рассчитанных значений соотношения времени индукции процесса (t_{uhd}) ко времени протекания процесса ($t_{кон}$ - t_{uhd}) и сопоставить их с аналогичными полученными в эксперименте. Эти данные представлены на рис. 8.



Рис. 8. Зависимость жёсткости *t*_{инд}/(*t*_{кон}-*t*_{инд}) кривой изменения концентрации сернистого газа во времени от температуры. 1 – расчёт, 2 – эксперимент.

Из рис. 8 видно, что экспериментальные данные совпадают с расчетными данными. В низкотемпературной области - до 800 К жёсткость кривой высока, и в этой области наблюдается прерывистый взрывной процесс, а при высоких температурах реакция окисления водорода протекает в спокойном режиме. Однако расчёты показали, что количество превращенного сернистого газа в молекулярную серу (S₂), независимо от температуры, достигает максимального значения ко времени процесса приблизительносекунда и они очень близки к 100%-ному превращению сернистого газа SO₂ в S₂. Исходя из этого, можно предположить, что такого типа процессы практичнее и выгоднее проводить при относительно низких температурах – до 900 *K*.

Следует отметить, что утилизация SO_2 в виде S_2 намного удобнее и практичнее, чем превращение сернистого газа в серный ангидрид. Использование порошкообразной серы намного проще в отличие от серного ангидрида, требующего его превращения в серную кислоту.

Заключение

Анализируя кинетические кривые изменения концентрации реагентов, свободных радикалов, монооксида серы и продуктов реакции в широком интервале температур можно предположить, что процесс окисления водорода в присутствии сернистого газа протекает по вырождено - цепному механизму и одним из главных инициаторов протекания процесса является первичный продукт превращения сернистого газа — закись серы (SO). Рассчитанное значение эффективной энергии активации не противоречит вышеизложенному предположению [29].

Утилизацию сернистого газа в виде элементарной серы целесообразно проводить при относительно низких температурах – до 900 *К*.

ԾԾՄԲԻ ԵՐԿՕՔՍԻԴԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ՋՐԱԾՆԻ ՕՔՍԻԴԱՑՄԱՆ ՇՂԹԱՑԱԿԱՆ ՌԵԱԿՑԻԱՅԻ ԿԻՆԵՏԻԿԱՑԻ ՎՐԱ

Է.Մ. ՄԱԿԱՐՅԱՆ*, Հ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ

Ուսումնասիրվել է ծծմբային գազի ազդեցությունը ջրածնի օքսիդացման գործընԹացի վրա։ Ցույց է տրվել, որ ջրածնի օքսիդացման ռեակցիան ծծմբի առկայությամբ ինքնաբռնկման տիրույթում երկօքսիդի որոշակի պայմաններում (ճնշում, ջերմաստիճան, գազային խառնուրդի բաղադրություն, կոնտակտի ժամանակ) ընթանում է տատանողական ռեժիմով, որն ուղեկցվում է լուսարձակմամբ։ Ցույց է տրվել, որ ջրածնի օքսիդացման պրոցեսի վրա ծծմբի երկօքսիդը փոքը քանակությամբ և ցածը ջերմաստիճաններում (700K-900K) ունի զգալի արագացնող ազդեցություն։ Տարբեր ջերմաստիճանների համար Թիվածնի սպառման կինետիկ կորերի հիման վրա, որոնք ստացվել են հաշվարկային եղանակով, որոշվել է ամբողջ պրոցեսի համար արդյունավետ ակտիվացման էներգիայի արժեքը։ Ծծմբի երկօքսիդի առկայությամբ ջրածնի ժամանակ փորձարարական օքսիդացման ստացված տվյալների համեմատությունը ուսումնասիրվող գործընթացի առաջարկված մոդելի

Տաշվարկների արդյունջների Տետ ցույց է տվել բարձր Տամապատասխանություն։ Պարզվել է, որ ծծմբի երկօքսիդի առկայության դեպքում ջրածնի օքսիդացման պրոցեսն ընթանում է փոփոխված շղթայական մեխանիզմով, և պրոցեսում էական դեր է խաղում ծծմբի երկօքսիդի փոխակերպման առաջնային արդասիքը՝ ծծմբի օքսիդը (SO)։

ON THE INFLUENCE OF SULFUR DIOXIDE ON THE KINETICS OF THE CHAIN REACTION OF HYDROGEN OXIDATION

EM. MAKARYAN*, H.A. HARUTYUNYAN

Institute of Chemical Physics named after. A.B. Nalbandyan NAS RA 0014, Yerevan, 5/2 P. Sevak str., E-mail: makaryan@mail.ru

The influence of sulfur dioxide on the process of hydrogen oxidation has been studied. It has been shown that the oxidation reaction of hydrogen in the presence of sulfur dioxide in the autoignition region under certain conditions (pressure, temperature, composition of the gas mixture, contact time) proceeds in an oscillatory mode and is accompanied by light emission.

It has been shown that sulfur dioxide in small quantities and at low temperatures (700 K-900 K) has a significant accelerating effect on the process of hydrogen oxidation.

Based on the kinetic curves of oxygen consumption for different temperatures, which were obtained by calculation, the value of the effective activation energy for the process as a whole was determined.

Comparison of experimental data obtained during the oxidation of hydrogen in the presence of sulfur dioxide with the results of calculations of the proposed model of the process under study showed good agreement.

It was found that the process of hydrogen oxidation in the presence of sulfur dioxide proceeds according to a degenerate-chain mechanism and the initial product of the transformation of sulfur dioxide, sulfur oxide (SO), plays a significant role in the process.

ЛИТЕРАТУРА

- Rasmusen G.L., Glarborg P., Marshall P. Mechanisms of radical removal by SO // Proc. Com bust. Inst., 2007, v. 31, pp. 339-347
- [2] Gimenez-Lopez J., Martinez M., Millera A., Bilbao R., Alzueta M.U. SO₂ effects on CO oxidation in a CO₂ atmosphere, characteristic of Oxy-Fuel Conditions // Combust. Flame, 2011, v. 158, pp. 48-56
- [3] *Kallend A.S.* Kinetics of the sulfur dioxide catalyzed recombination of radicals in hydrogen flames // Combust. Flame, 1972, v. 19, №2, pp. 227-236.
- [4] Durie R.A., Smith M.Y., Johnson G.M. The effect of sulfur dioxide on hydrogen-atom recombination in the burnt gas of premixed fuel-rich propane-oxygen-nitrogen flames // Combust. Flame, 1971, v.17, №2, pp. 197-203.
- [5] Мкрян Т.Г., Гукасян П.С., Манташян А.А. Медленное и холоднопламенное окисления пропана в присутствии сернистого ангидрида // Хим. физика, 2002, т. 21, №11, с. 33-42.
- [6] Макарян Э.М., Гукасян П.С., Арутюнян А.А. Изучение природы вспышек светоизлучения процесса окисления водорода в присутствии SO₂// ЖФХ, 2023, т. 97, № 8, с. 1213-1217. DOI: 10.31857/S0044453723080150

- [7] МанташянА.А. Кинетические проявления процесса низкотемпературного горения углеводородов и водорода – холодные и прерывистые пламена. // ФГВ, 2016, т. 52, №2, с. 3-17.
- [8] Манташян А.А. Многообразие кинетических проявлений цепных разветвлённых реакций // Хим. физика, 2021, т. 40, №4, с. 1-10.
- [9] Lutz A.E., Kee R.J., Miller J.A. SENKIN: a fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis// Sandia National Laboratory, Rep. SAND-87-8248.
- $[10] \ https://ntrl.ntis.gov/NTRL/dashboard/searchResults/titleDetail/DE88006928.xhtml$
- [11] Semenov N. On the constants of the reactions $H + O_2 = OH + O$ and $H_2 + O_2 = 20H //$ Acta Physicochim. U.R.S.S., 1945, v. 20, pp. 291-292
- [12] Baulch D.L., Drysdale D.D., Horne D.G. An assessment of rate data for high-temperature systems. // Symp. Int. Combust. Proc., 1973, v. 14, pp. 107-118.
- [13] Baulch D.L., Cobos C.J., Cox R.A., Frank P., Hayman G., Just Th., Kerr J.A., Murrells T., Pilling M.J., Troe J., Walker R.W., Warnatz J. - Evaluated kinetic data for combustion modelling. Supplement I // J. Phys. Chem. Ref. Data, 1994, v. 23, pp. 847 - 1033.
- [14] Baulch D.L., Cobos C.J., Cox R.A., Esser C., Frank P., Just Th., Kerr J.A., Pilling M.J., Troe J., Walker R.W., Warnatz J. - Evaluated kinetic data for combustion modelling // J. Phys. Chem. Ref. Data, 1992, v. 21, pp. 411- 429.
- [15] Pirraglia A.N., Michael J.V., Sutherland J.W., Klemm R.B. A flash photolysis-shock tube kinetic study of the H atom reaction with O₂: H + O₂ = OH + O and H + O₂ + Ar → HO₂ + Ar // J.Phys. Chem., 1989, v. 93, pp. 282-291.
- [16] Warrantz J. Critical Survey of Elementary Reaction Rate Coefficients in the C/H/O System, in: W.C. Gardiner (ed.) // Combustion Chemistry, Springer, New York (1984).
- [17] Blitz M.A., Hughes K.J., Pilling M.J., Robertson S.H. Combined experimental and master equation investigation of the multiwall reaction H+SO₂ // J. Phys. Chem. A, 2006, v. 110, pp. 2996 - 3009.
- [18] Stickel R.E., Chin M., Daykin E.P., Hynes A.J., Wine P.H., Wallington T.J. Mechanistic studies of the OH-initiated oxidation of CS2 in the presence of O2 // J. Phys. Chem., 1993, v. 97, pp. 13653–13661.
- [19] Goumri A., Rocha J.-D. R., Laakso D., Smith C.E., Marshall P. Characterization of reaction pathways on the potential energy surfaces for H + SO₂ and HS + O₂ // J. Phys. Chem. A, 1999, v. 103, pp. 11328 - 11335.
- [20] *Schofield K.* Evaluated chemical kinetic rate constants for various gas phase reactions // J. Phys. Chem. Ref. Data, 1973, v. 2, pp. 25 - 84.
- [21] Lu C.W., Wu Y.J., Lee Y.P., Zhu R.S., Lin M.C. Experiments and calculations on rate coefficients for pyrolysis of SO₂ and the reaction O plus SO at high temperatures // J. Phys. Chem. A, 2003, v. 107, pp. 11020 - 11029.
- [22] Singleton D.L., Cvetanovic R.J. Evaluated chemical kinetic data for the reactions of atomic oxygen O(3P) with sulfur containing compounds // J. Phys. Chem., 1988, Ref. Data, v. 17, pp. 1377-1384.
- [23] Lu C.W., Wu Y.J., Lee Y.P., Zhu R.S., Lin M.C. Experimental and theoretical investigations of rate coefficients of the reaction S(3P) + O₂ in the temperature range 298-878 K // J. Chem. Phys., 2004, v. 121, pp. 8271 - 8278.
- [24] Atkinson R., Baulch D.L., Cox R.A., Crowley J.N., Hampson R.F., Hynes R.G., Jenkin M.E., Rossi M.J., Troe J. - Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry: Volume I - gas phase reactions of Ox, HO_x, NO_x and SO_x species. // Atmos. Chem. Phys., 2004, v. 4, pp. 1461 - 1738.

- [25] Murakami Y., Onishi S., Kobayashi T., Fujii N., Isshiki N., Tsuchiya K., Tezaki A., Matsui H. High temperature reaction of S+SO₂ → SO+SO: Implication of S₂O₂ intermediate complex formation // J. Phys. Chem. A., 2003, v. 107, pp. 10996 11000.
- [26] Du S.Y., Francisco J.S., Shepler B.C., Peterson K.A. Determination of the rate constant for sulfur recombination by quasiclassical trajectory calculations// J. Chem. Phys., 2008 v. 128, p. 204306. https://doi.org/10.1063/1.2919569.
- [27] Durie R.A., Smith M.Y., Johnson G.M. The effect of sulfur dioxide on hydrogen-atom recombination in the burnt gas of premixed fuel-rich propane-oxygen-nitrogen flames // Combust. Flame, 1971, v. 17. № 2, pp. 197-203.
- [28] Naidoo J., Goumri A., Marsha P. A kinetic study of the reaction of atomic oxygen with SO2. // Proc. Combust. Inst. – 2005, v. 30, pp. 1219 – 1225.
- [29] Chung K., Calvert J.G., Bottenheim J.W. The photochemistry of sulfur dioxide excited within its first allowed band (3130 Å) and the "forbidden" band (3700–4000 Å) // Int. J. Chem. Kinet., 1975, v. 7, pp. 161-168.
- [30] *Манташян А.А.* Цепные реакции и сопряжённые процессы. Ереван: Издательство «ГИТУТЮН» НАН РА, 2021, с.8