

表 1.1: H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 反応機構 (Chemkin 形式)

```

reactions
! - major three chain branching/propagation reactions
H+O2=OH+O      9.756e+013  0.000  14844.6
O+H2=OH+H      5.120e+004  2.670  6278.7
H2O+H=H2+OH    4.520e+008  1.600  18422.6
! - major near-termination forming HO2
H+O2+M=HO2+M   2.100e+018  -0.800  0.0
      N2/0.67/ O2/0.4/ CO2/1.5/ H2O/0/ AR/0.29/
O2+H+H2O=HO2+H2O  6.890e+015  0.000  -2086.5
! - OH/HO2 radical chain degradation/termination
OH+OH=O+H2O    1.510e+009  1.140  100.4
OH+HO2=H2O+O2  2.890e+013  0.000  -497.1
H+HO2=H2+O2    4.280e+013  0.000  1410.1
HO2+HO2=H2O2+O2  4.220e+014  0.000  11983.7
      duplicate
HO2+HO2=H2O2+O2  1.320e+011  0.000  -1630.0
      duplicate
! - HO2 radical chain reactivation/propagation
H+HO2=OH+OH    1.690e+014  0.000  874.8
H+HO2=H2O+O    3.010e+013  0.000  1720.8
O+HO2=O2+OH    3.190e+013  0.000  0.0
! - H2O2 reactions
OH+OH(+M)=H2O2(+M)  7.230e+013  -0.370  0.0
      low / 5.530e+019  -0.760  0.0 /
      troe / 1 1 1 1040 /
      N2/0.4/ O2/0.4/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ AR/0.35/
H2O2+H=HO2+H2  1.690e+012  0.000  3754.8
H2O2+H=OH+H2O  1.020e+013  0.000  3577.9
H2O2+O=OH+HO2  6.620e+011  0.000  3974.7
H2O2+OH=H2O+HO2  7.830e+012  0.000  1331.3
! - recombination chain termination/degradation
H+H+M=H2+M    1.870e+018  -1.000  0.0
      N2/0.4/ O2/0.4/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ AR/0.35/
H+H+H2=H2+H2  9.790e+016  -0.600  0.0
H+O+M=OH+M    1.180e+019  -1.000  0.0
      N2/0.4/ O2/0.4/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ AR/0.35/
H+OH+M=H2O+M  5.530e+022  -2.000  0.0
      N2/0.4/ O2/0.4/ CO2/1.5/ H2O/2.55/ AR/0.15/
O+O+M=O2+M    5.400e+013  0.000  -1787.8
      N2/0.4/ O2/0.4/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ AR/0.35/
end
    
```

表 1.2: Cl<sub>2</sub>-H<sub>2</sub> 連鎖反応系の反応速度定数

反応	A [cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	E <sub>a</sub> / R [K]	k (298 K) [cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
(1) Cl + H <sub>2</sub> → H + HCl	2.2 × 10 <sup>13</sup>	2300	9.8 × 10 <sup>9</sup>
(2) H + Cl <sub>2</sub> → Cl + HCl	4.8 × 10 <sup>13</sup>	416	1.2 × 10 <sup>13</sup>

表 1.3 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 連鎖反応系の反応速度定数

反応	A [cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]	b	E <sub>a</sub> / R [K]	k (1000 K) [cm <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
(1) H + O <sub>2</sub> → OH + O	9.8 × 10 <sup>13</sup>	0	7470	5.6 × 10 <sup>10</sup>
(2) O + H <sub>2</sub> → OH + H	5.1 × 10 <sup>4</sup>	2.67	3160	2.2 × 10 <sup>11</sup>
(3) OH + H <sub>2</sub> → H <sub>2</sub> O + H	1.0 × 10 <sup>8</sup>	1.6	1660	1.2 × 10 <sup>12</sup>
* (4) H + O <sub>2</sub> + M → HO <sub>2</sub> + M	1.7 × 10 <sup>18</sup>	-0.8	0	6.8 × 10 <sup>15</sup>

\* (4) の A と k (1000K) の単位は [cm<sup>6</sup> mol<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>].

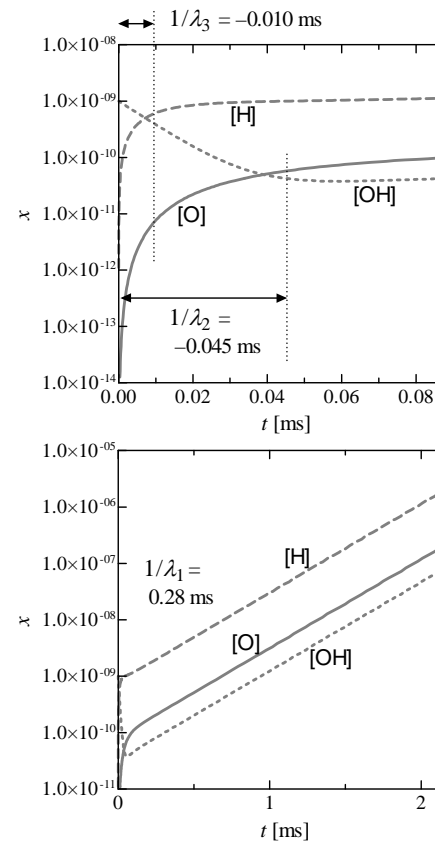


図 1.1: H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 連鎖反応  
[H<sub>2</sub>:O<sub>2</sub> = 2:1, p = 0.01 atm,  
T = 1000 K, x(OH)<sub>0</sub> = 1 × 10<sup>-9</sup>]

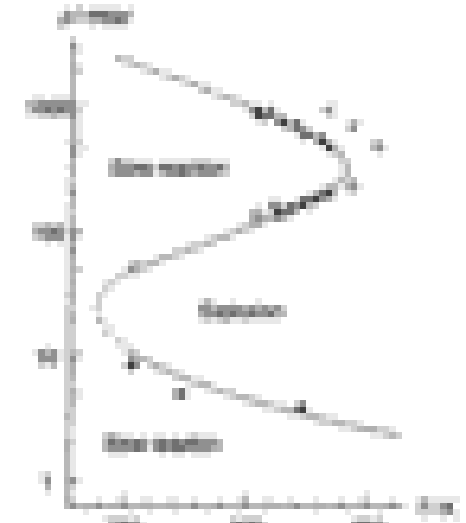


図 1.2: H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 爆発限界  
800 K 付近を見たときに限界曲線を  
下から (低圧から) 順に、第一限界、  
第二限界、第三限界と呼ばれる。