

УДК 535.34

PACS: 82.50.-m

Кинетика генерации озона во влажном воздухе УФ-излучением ртутной лампы низкого давления

М. Г. Брюков, А. С. Дмитрук, Л. М. Василяк, В. С. Арутюнов

Предложен механизм образования озона при фотолизе влажного воздуха ультрафиолетовым излучением ртутной лампы низкого давления. Кинетическая схема фотолиза содержит 4 фотохимические реакции, иницируемые квантами излучения на длине волны 184,95 нм, 4 фотохимические реакции, иницируемые квантами излучения на длине волны 253,65 нм, и 35 обратимых элементарных стадий с участием 12 частиц (атомов, радикалов и молекул). Численное моделирование с использованием предложенного механизма показало хорошее согласие с экспериментальными результатами.

Ключевые слова: ультрафиолетовое излучение, озон, воздух, кинетическое моделирование, ртутная лампа низкого давления.

Ссылка: Брюков М. Г., Дмитрук А. С., Василяк Л. М., Арутюнов В. С. // Прикладная физика. 2020. № 4. С. 5.

Reference: M. G. Bryukov, A. S. Dmitruk, L. M. Vasilyak, and V. S. Arutyunov, Prikl. Fiz., No. 4, 5 (2020).

Введение

Озон имеет высокий окислительный потенциал, поэтому широко применяется в различных технологиях [1–5] и в лабораторной практике. Озон является сильно токсичным веществом [6], ПДК в атмосферном воздухе составляет $0,03 \text{ мг/м}^3$, поэтому выбросов озона в окружающую среду следует избегать. Озон имеет острый слегка сладковатый запах, который легко почувствовать после грозы. Несмотря на вредное воздействие озона на живые организмы и другие объекты окружа-

ющей среды, это вещество играет важную роль в физико-химических процессах атмосферы Земли. Озоновый слой экранирует и защищает Землю от губительного воздействия жесткого УФ-излучения Солнца. Поэтому изучение фотолиза воздуха УФ-излучением и процессов образования озона, имеет важное значение не только для технологических применений, но также для токсикологии, экологии, химии окружающей среды, химии атмосферы и очистки воздуха [3, 6].

Озон традиционно получают с помощью электрических разрядов при высоком давлении: коронного, стримерного и барьерного. Именно с помощью барьерных разрядов получают озон в промышленных объемах и с минимальными энергозатратами. Однако, электроразрядным способам присущ ряд недостатков, таких как: свойства и эффективность генерации озона сильно снижается при повышении влажности и температуры воздуха, наличия в нем примесей и состояния электродов и изоляторов; при высокой влажности воздуха ресурс оборудования резко снижается; в таких разрядах используется высокое напряжение, что может быть опасным при вы-

Брюков Михаил Георгиевич¹, вед. эксперт, к.ф.-м.н.

Дмитрук Анна Сергеевна¹, м.н.с.

Василяк Леонид Михайлович², г.н.с., д.ф.-м.н.

Арутюнов Владимир Сергеевич¹, г.н.с., д.х.н.

¹ Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова РАН.

Россия, 119991, Москва, ул. Косыгина, 4.

² Объединенный институт высоких температур РАН.

Россия, 125412, Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2.

E-mail: vasilyak@ihed.ras.ru, v_arutyunov@mail.ru

Статья поступила в редакцию 04 июня 2020 г.

© Брюков М. Г., Дмитрук А. С., Василяк Л. М., Арутюнов В. С., 2020

сокой влажности в помещении; для обслуживания и ремонта оборудования требуется персонал с высокой квалификацией и разрешение на проведение работ с высоким напряжением; для транспортировки озона от электродов к обрабатываемому объему необходимо организовать поток воздуха. В результате, разряды по тем или иным причинам могут быть неудобны потребителям, поэтому начинается поиск других методов.

В последнее время для генерации озона все чаще стали использовать УФ-лампы с рядом низкого давления в смесях с парами ртути, которые излучают две сильные линии 184,95 и 253,65 нм. Этому способствует ряд объективных причин и преимуществ по сравнению с электрическими разрядами: 1) Разработаны и выпускаются УФ-лампы низкого давления с парами ртути с высокой электрической мощностью до 1 кВт, в которых 40–50 % мощности разряда преобразуются в эти две линии; 2) Большой рабочий ресурс – более года; 3) Стабильность работы и ресурс ламп не зависят от влажности воздуха и примесей; 4) Простота эксплуатации и замены ламп. Не требуется высококвалифицированный персонал; 5) Отсутствует высокое напряжение; 6) Удобство использования, лампы можно расположить около протяженного объекта, озон образуется в объеме. Именно поэтому УФ-лампы стали использовать для получения озона в лабораториях, для озонирования помещений, для удаления запахов, для очистки от жировых отложений на стенках систем вентиляции на кухнях общественного питания.

Ультрафиолетовые (УФ) ртутные лампы низкого давления с двумя сильными УФ-линиями 184,95 и 253,65 нм в последнее время стали применяться в газофазных фотореакторах в качестве одной из стадий очистки воздуха от дурнопахнущих и токсичных веществ [1, 2, 5]. Фотолиз воздуха УФ-излучением с длиной волны 184,95 нм приводит к генерации озона (O_3) в реакционной зоне фотореактора [3–5]. При этом в воздухе протекают не только реакции образования озона, но и других активных частиц и радикалов. В работе [4] показано, что повышение влажности воздуха, который подвергается фотолизу УФ-излучением с длиной волны 184,95 и 253,65 нм, приводит к снижению концентрации озона, но

увеличению концентрации гидроксильных радикалов OH в фотореакторе. Потому удаление примесей дурнопахнущих и токсичных веществ в воздухе методом фотоокисления УФ-излучением более эффективно протекает при повышенной влажности воздуха, поскольку реакции активных OH радикалов с молекулами этих примесей инициируют процессы окисления последних [5]. В связи с этим создание кинетической схемы для расчетов генерации озона является важным для разработчиков и производителей различного оборудования с генерацией озона УФ-лампами.

Цель данной работы – предложить детальный кинетический механизм, адекватно описывающий кинетику образования и расхода озона при фотолизе влажного воздуха УФ-излучением на длинах волн 184,95 и 253,65 нм, соответствующих УФ-излучению ртутной лампы низкого давления.

Кинетический механизм

Реакционный механизм для численного моделирования сложной фотохимической кинетики генерации озона при фотолизе влажного воздуха УФ-излучением, предложенный в настоящей работе, разработан на основе анализа литературных данных. Ключевые фотохимические реакции, инициируемые квантами ультрафиолетового излучения, и элементарные химические реакции, которые контролируют образование и распад озона, были взяты из работы [5]. Они были дополнены рядом реакций с участием возбужденных состояний $O_2(a^1\Delta_g)$ и $O_2(b^1\Sigma_g^+)$ молекулярного кислорода, необходимых для детализации механизма. Сформированный таким образом детальный кинетический механизм (таблица) содержит 4 фотохимические реакции, инициируемые квантами УФ-излучения 184,95 нм, 4 фотохимические реакции, инициируемых квантами УФ-излучения 253,65 нм, и 35 индивидуальных обратимых химических реакций с участием 12 частиц.

Сечения фотопроцессов и константы скорости реакций подбирались на основе подробного анализа литературных данных. Ссылки на соответствующие публикации указаны в таблице. Сечения и константы скорости представлены в виде модифицированной

трёхпараметрической аррениусовской зависимости. Температурная зависимость сечений фотореакций в области температур 10–50 °С и давлений около 1 атм также хорошо (в пределах разброса экспериментальных данных)

описывается такой аппроксимацией. Константы скорости обратных реакций вычислялись по константам скорости прямых реакций на основе термодинамических данных работы [16].

Таблица

Кинетический механизм образования озона во влажном воздухе под действием УФ-излучения с длинами волн 184,95 и 253,65 нм

	Реакции	<i>A</i>	<i>n</i>	<i>E</i> , кал/моль	Ссылки
R1	$O_2 + hv_1 \rightarrow O + O$	$1,2 \times 10^{-20}$	0	0	[4]
R2	$O + O_2 + M \leftrightarrow O_3 + M$ $H_2O / 12 / ^a$	$5,29 \times 10^{-28}$	-2,4	0	[7]
R3	$O_3 + hv_2 \rightarrow O_2(a^1\Delta_g) + O(^1D)$	$1,04 \times 10^{-17}$	0	0	[7, 8]
R4	$O_3 + hv_2 \rightarrow O_2 + O$	$1,15 \times 10^{-18}$	0	0	[7, 8]
R5	$H_2O + hv_1 \rightarrow OH + O$	$1,54 \times 10^{-19}$	-0,092	144	[9, 10]
R6	$O + O_3 \leftrightarrow O_2 + O_2$	$8,0 \times 10^{-12}$	0	4094	[7]
R7	$O(^1D) + N_2 \leftrightarrow O + N_2$	$2,15 \times 10^{-11}$	0	-219	[7]
R8	$O(^1D) + O_2 \leftrightarrow O + O_2(a^1\Delta_g)$	$6,6 \times 10^{-12}$	0	-109	[7]
R9	$O(^1D) + O_2 \leftrightarrow O + O_2(b^1\Sigma_g^+)$	$2,64 \times 10^{-11}$	0	-109	[7]
R10	$O(^1D) + H_2O \leftrightarrow OH + OH$	$1,63 \times 10^{-10}$	0	-119	[7]
R11	$O(^1D) + O_3 \leftrightarrow O_2 + O_2$	$1,2 \times 10^{-10}$	0	0	[7]
R12	$O(^1D) + O_3 \leftrightarrow O + O + O_2$	$1,2 \times 10^{-10}$	0	0	[7]
R13	$O_2(a^1\Delta_g) + O_2 \leftrightarrow O_2 + O_2$	$3,6 \times 10^{-18}$	0	437	[7]
R14	$O_2(a^1\Delta_g) + O_3 \leftrightarrow O_2 + O_2 + O$	$5,2 \times 10^{-11}$	0	5644	[7]
R15	$O_2(a^1\Delta_g) + H_2O \leftrightarrow O_2 + H_2O$	$4,8 \times 10^{-18}$	0	0	[7]
R16	$O_2(a^1\Delta_g) + O_2(a^1\Delta_g) \leftrightarrow O_2 + O_2$	$1,4 \times 10^{-17}$	0	0	[11]
R17	$O_2(a^1\Delta_g) + O_2(a^1\Delta_g) \leftrightarrow O_2 + O_2(b^1\Sigma_g^+)$	$1,4 \times 10^{-17}$	0	0	[11]
R18	$O_2(b^1\Sigma_g^+) + N_2 \leftrightarrow O_2 + N_2$	$1,8 \times 10^{-16}$	0	-89	[7, 11]
R19	$O_2(b^1\Sigma_g^+) + N_2 \leftrightarrow O_2(a^1\Delta_g) + N_2$	$1,62 \times 10^{-15}$	0	-89	[7, 11]
R20	$O_2(b^1\Sigma_g^+) + H_2O \leftrightarrow O_2 + H_2O$	$3,9 \times 10^{-12}$	0	-248	[7]
R21	$O_2(b^1\Sigma_g^+) + O_3 \leftrightarrow O_2 + O_3$	$1,05 \times 10^{-12}$	0	268	[7, 11]
R22	$O_2(b^1\Sigma_g^+) + O_3 \leftrightarrow O_2(a^1\Delta_g) + O_3$	$9,45 \times 10^{-12}$	0	268	[7, 11]
R23	$O_2(b^1\Sigma_g^+) + O_3 \leftrightarrow O_2 + O_2 + O$	$2,45 \times 10^{-11}$	0	268	[7, 11]
R24	$OH + O \leftrightarrow O_2 + H$	$1,8 \times 10^{-11}$	0	-358	[7]
R25	$H + O_2(+M) \leftrightarrow HO_2(+M)$	$2,4 \times 10^{-11}$	0,2	0	[7]
	Low pressure limit: $H_2O / 14 / ^a F_{cent} = 0,6$	$7,31 \times 10^{-29}$	-1,3	0	
R26	$O + HO_2 \leftrightarrow OH + O_2$	$3,0 \times 10^{-11}$	0	-397	[7]
R27	$OH + HO_2 \leftrightarrow H_2O + O_2$	$4,8 \times 10^{-11}$	0	-497	[7]
R28	$H + O_3 \leftrightarrow OH + O_2$	$1,4 \times 10^{-10}$	0	934	[7]
R29	$H + HO_2 \leftrightarrow OH + OH$	$7,2 \times 10^{-11}$	0	0	[7]
R30	$H + HO_2 \leftrightarrow H_2 + O_2$	$6,9 \times 10^{-12}$	0	0	[7]
R31	$H + HO_2 \leftrightarrow O + H_2O$	$1,6 \times 10^{-12}$	0	0	[7]
R32	$OH + OH \leftrightarrow H_2O + O$	$1,8 \times 10^{-12}$	0	0	[7]
R33	$OH + OH(+M) \leftrightarrow H_2O_2(+M)$	$2,6 \times 10^{-11}$	0	0	[7]
	Low pressure limit: $H_2O / 12 / ^a F_{cent} = 0,6$	$2,07 \times 10^{-28}$	-1	0	
R34	$OH + H_2O_2 \leftrightarrow HO_2 + H_2O$	$2,51 \times 10^{-12}$	0	250	[12]
R35	$OH + O_3 \leftrightarrow HO_2 + O_2$	$1,7 \times 10^{-12}$	0	1868	[7]
R36	$HO_2 + HO_2 \leftrightarrow H_2O_2 + O_2$	$3,0 \times 10^{-13}$	0	-914	[7]

Окончание таблицы

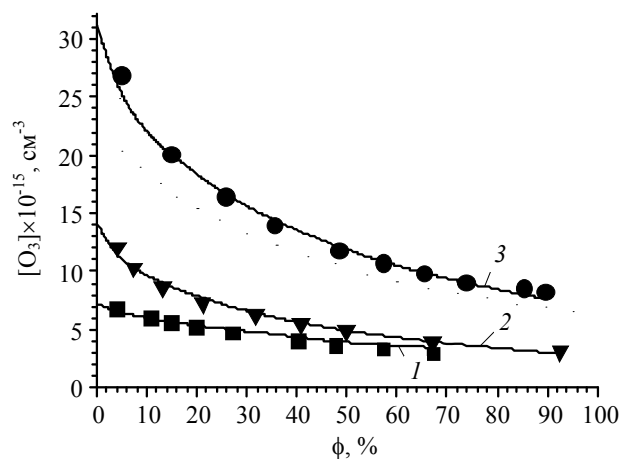
	Реакции	A	n	E , кал/моль	Ссылки
R37	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 + \text{M} \leftrightarrow \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2 + \text{M}$ $\text{H}_2\text{O} / 12 / a$	$2,1 \times 10^{-33}$	0	-1828	[7]
R38	$\text{HO}_2 + \text{O}_3 \leftrightarrow \text{OH} + \text{O}_2 + \text{O}_2$	$1,0 \times 10^{-14}$	0	974	[7]
R39	$\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 \leftrightarrow \text{OH} + \text{HO}_2$	$1,4 \times 10^{-12}$	0	3974	[7]
R40	$\text{H}_2\text{O}_2 + h\nu_1 \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$8,0 \times 10^{-19}$	0	0	[4]
R41	$\text{H}_2\text{O}_2 + h\nu_2 \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	$6,12 \times 10^{-24}$	1,403	-815	[13, 14]
R42	$\text{HO}_2 + h\nu_1 \rightarrow \text{OH} + \text{O}(^1\text{D})$	$3,51 \times 10^{-18}$	0	0	[15]
R43	$\text{HO}_2 + h\nu_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$	$3,22 \times 10^{-19}$	0	0	[7]

Примечания: $h\nu_1$ и $h\nu_2$ – энергии квантов излучения с длинами волн 184,95 и 253,65 нм соответственно. Сечения фотохимических реакций и константы скорости индивидуальных химических реакций представлены модифицированной трёхпараметрической зависимостью Аррениуса $\sigma(T) = AT^n \exp(-E/RT)$ [см²/молекула] и $k(T) = AT^j \exp(-E/RT)$ [см^{3(j-1)}/(молекула^{j-1} с)] соответственно, где A , n , E – параметры аппроксимации; T [K] – температура, $R = 1,987207$ кал/(моль К) – универсальная газовая постоянная и $j = 1, 2, 3$ – порядок реакции; a – коэффициент эффективности столкновения с молекулами воды.

Численное моделирование кинетики фотохимического процесса

Для проверки предсказательной способности предложенного кинетического механизма было проведено численное моделирование образования озона в воздухе с различной влажностью под действием УФ-излучения с длинами волн 184,95 и 253,65 нм в условиях экспериментов публикации [4]. В этих экспериментах воздух различной влажности пропускали вдоль оси проточного реактора цилиндрической формы длиной 36 см и диаметром 8 или 16 см с расположенной коаксиально на оси цилиндрической ртутной лампой низкого давления диаметром 1,8 см. Мощность излучения линий 184,95 и 253,65 нм во всех эксперимента была равна 1,9 и 12,2 Вт соответственно. В каждой серии экспериментов варьировалась влажность ϕ во входном потоке газа. На рисунке символами показаны экспериментальные данные работы [4] для следующих условий: 1 – воздух, диаметр реактора 16 см, расход газа 200 см³/с, $t = 20,2$ °C; 2 – воздух, диаметр реактора 16 см, расход газа 100 см³/с, $t = 22,3$ °C; 3 – эквимолярная смесь азота с воздухом, диаметр реактора 8 см, расход газа 50 см³/с, $t = 23,9$ °C.

Моделирование кинетики фотохимического процесса проводили на программном комплексе Chemical Workbench 4.2 [17]. Все газодинамические расчёты течений и определение освещённости элементарных объёмов газа выполнялись с помощью пакета программ [18].



Зависимость концентрации озона [O₃] на выходе реактора от относительной влажности ϕ газа на входе.

Расчёты показали, что интенсивное перемешивание потоков газа приводит к приблизительно однородному составу в сечении, перпендикулярном оси симметрии реактора. Коэффициент поглощения УФ-излучения на длине волны 184,95 нм в условиях экспериментов работы [4] не изменяется по длине реактора, поскольку практически полностью определяется поглощением молекул кислорода и воды, изменением концентрации которых в процессе фотолиза можно пренебречь. Коэффициент поглощения УФ-излучения на длине волны 253,65 нм зависит от изменения концентрации озона вдоль реактора по мере протекания фотолиза, поэтому в расчётах применяли метод последовательных приближений. В расчётах реактор разбивали плоскостями, перпендикулярными его оси симметрии.

рии, на 10 равных реакционных объёмов (разбиение на 2 равных объёма приводило к практически тому же результату).

Моделирование кинетики фотохимических превращений, протекающих в каждом реакционном объёме, проводили на модели струевого реактора идеального вытеснения с заданной температурой. Все реакторы соединялись последовательно в цепочку [17]. В качестве начального приближения брали зависимость концентрации озона от координаты реактора, которая была получена при нулевой интенсивности излучения линий с длиной волны 253,65 нм. В последующих итерациях расчёты проводили при экспериментальных значениях мощности излучения линий 184,95 и 253,65 нм. Для каждого объёма разбиения фотореактора по известным коэффициентам поглощения определяли входную и выходную мощность излучения линий 184,95 и 253,65 нм, причём в этих расчётах предполагалось, что поверхность ртутной лампы имеет равномерную способность излучения по любому направлению, и стенки реактора не отражают излучение. На основе этих данных о распределении УФ-излучения в соответствии с законом Бугера-Ламберта-Бера определяли скорости фотореакций R1, R3-R5, R40-R43.

Результаты моделирования показаны на рисунке сплошными линиями. С увеличением влажности падение концентрации озона на выходе фотореактора происходит по цепному механизму в результате протекания реакций R35 и R38. Моделирование не только качественно, но количественно хорошо согласуется с экспериментами. Сопоставление экспериментально измеренных абсолютных концентраций озона на выходе реактора в работе [4] с соответствующими результатами численного моделирования даёт среднеквадратичную относительную погрешность всего 5,1 %, что сравнимо с экспериментальным статистическим разбросом, среднеквадратичное значение которого по нашим оценкам составляет 3,3 %.

Заключение

Предложен детальный кинетический механизм для описания генерации озона при фотолитизе влажного воздуха УФ-излучением ртутной лампы низкого давления на длинах волн 184,95 и 253,65 нм. Сравнение результа-

тов моделирования с использованием данного механизма на программном комплексе Chemical Workbench 4.2 с экспериментальными данными показало хорошее согласие и возможность его использования для предсказательных расчетов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук, тема ФИЦ ХФ РАН № 47.16, номер гос. регистрации АААА-А20-120020590084-9.

ЛИТЕРАТУРА

1. ЛИТ Ультрафиолетовые технологии. <https://www.lit-uv.com/ru/products/odor-removal/ventlit-ind/> (дата обращения: 15.05.2020).
2. Centriair. <http://www.centriair.com/> (дата обращения: 15.05.2020).
3. *Jacobson M. Z.* Fundamentals of Atmospheric Modeling. Second Edition. – Cambridge University Press. 2005.
4. *Ono R., Nakagawa Yu., Tokumitsu Yu., Matsumoto H., Oda T.* // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 2014. Vol. 274. P. 13.
5. *Богомолов М. В., Брюков М. Г., Васильев А. И., Василяк Л. М., Касаткин Е. М., Костюченко С. В., Кудрявцев Н. Н., Левченко Д. А., Собур Д. А., Стрельцов С. А.* // Успехи прикладной физики. 2019. Т. 7. № 2. С. 165.
6. *Iriti M., Faoro F.* // Water Air and Soil Pollution. 2008. Vol. 187. P. 285.
7. *Burkholder J. B., Sander S. P., Abbatt J., Barker J. R., Huie R. E., Kolb C. E., Kurylo M. J., Orkin V. L., Wilmouth D. M., Wine P. H.* Evaluation No. 18. JPL Publication 15-10. Jet Propulsion Laboratory. Pasadena, 2015 <http://jpldataeval.jpl.nasa.gov/> (дата обращения: 15.05.2020).
8. *Barnes J., Mauersberger K.* // Journal of Geophysical Research. 1987. Vol. 92. № D12. P. 14861.
9. *Cantrell C. A., Zimmer A., Tyndall G. S.* // Geophys. Res. Lett. 1997. Vol. 24. P. 2195.
10. *Creasey D. J., Heard D. E., Lee J. D.* // Geophys. Res. Lett. 2000. Vol. 27. P. 1651.
11. *Stafford D. S., Kushner M. J.* // J. Appl. Phys. 2004. Vol. 96. P. 2451.
12. *Keyser L. F.* // J. Phys. Chem. 1980. Vol. 84. № 13. P. 1659.
13. *Nicovich J. M., Wine P. H.* // Journal of Geophysical Research. 1988. Vol. 93. № D3. P. 2417.
14. *Vaghjiani G. L., Ravishankara A. R.* // Journal of Geophysical Research. 1989. Vol. 94. № D3. P. 3487.
15. *Hochanadel C. J., Ghormley J. A., Ogren P. J.* // J. Chem. Phys. 1972. Vol. 56. P. 4426.
16. *Burcat A.* Thermochemical species in polynomial form // Technion. Israel Institute of Technology. <https://burcat.technion.ac.il/> (дата обращения: 15.05.2020).

17. Chemical Workbench 4.2. <http://www.kintechlab.com/products/chemical-workbench/> (дата обращения: 15.05.2020).

18. OpenFOAM release v1712. <https://www.openfoam.com/> (дата обращения 15.05.2020).

PACS: 82.50.-m

Kinetics of ozone generation in humid air by UV radiation of a low-pressure mercury lamp

M. G. Bryukov¹, A. S. Dmitruk¹, L. M. Vasilyak², and V. S. Arutyunov¹

¹N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of Russian Academy of Sciences
4 Kosygin st., Moscow, 119991, Russia

²Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences
Bld. 2, 13 Izhorskaya st., Moscow, 125412, Russia

Received June 04, 2020

A mechanism of ozone formation during photolysis of humid air by ultraviolet radiation of a low-pressure mercury lamp is proposed. The kinetic scheme of photolysis contains 4 photochemical reactions initiated by radiation at a wavelength of 184.95 nm, 4 photochemical reactions initiated by radiation at a wavelength of 253.65 nm, and 35 reversible elementary stages involving 12 particles (atoms, radicals, and molecules). Numerical simulations using the proposed mechanism showed good agreement with experimental results.

Keywords: ultraviolet radiation, ozone, air, kinetic modeling, low-pressure mercury lamp.

REFERENCES

1. LIT UV technologies, Available at: <https://www.lit-uv.com/ru/products/odor-removal/ventlit-ind/> (accessed May 15, 2020).
2. <http://www.centriair.com/> (accessed May 15, 2020).
3. M. Z. Jacobson, *Fundamentals of Atmospheric Modeling. Second Edition* (Cambridge University Press, 2005).
4. R. Ono, Yu. Nakagawa, Yu. Tokumitsu, H. Matsumoto, and T. Oda, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* **274**, 13 (2014).
5. M. V. Bogomolov, M. G. Bryukov, A. I. Vasiliev, L. M. Vasilyak, E. M. Kasatkin, S. V. Kostyuchenko, N. N. Kudryavtsev, D. A. Levchenko, D. A. Sobur, and S. A. Streltsov, *Usp. Prikl. Fiz.* **7** (2), 165 (2019).
6. M. Iriti and F. Faoro, *Water Air and Soil Pollution* **187**, 285 (2008).
7. J. B. Burkholder, S. P. Sander, J. Abbatt, J. R. Barker, R. E. Huie, C. E. Kolb, M. J. Kurylo, V. L. Orkin, D. M. Wilmouth, and P. H. Wine, *Chemical Kinetics and Photochemical Data for Use in Atmospheric Studies, Evaluation No. 18*, JPL Publication 15-10, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, 2015 <http://jpldataeval.jpl.nasa.gov/> (accessed May 15, 2020).
8. J. Barnes and K. Mauersberger, *J. Geophys. Res. Lett.* **92** (D12), 14861 (1987).
9. C. A. Cantrell, A. Zimmer, and G. S. Tyndall, *Geophys. Res. Lett.* **24**, 2195 (1997).
10. D. J. Creasey, D. E. Heard, and J. D. Lee, *J. Geophys. Res. Lett.* **27**, 1651 (2000).
11. D. S. Stafford and M. J. Kushner, *J. Appl. Phys.* **96**, 2451 (2004).
12. L. F. Keyser, *J. Phys. Chem.* **84** (13), 1659 (1980).
13. J. M. Nicovich and P. H. Wine, *J. Geophys. Res.* **93** (D3), 2417 (1988).
14. G. L. Vaghjiani and A. R. Ravishankara, *J. Geophys. Res.* **94** (D3), 3487 (1989).
15. C. J. Hochanadel, J. A. Ghormley, and P. J. Ogren, *J. Chem. Phys.* **56**, 4426 (1972).
16. A. Burcat. Thermochemical species in polynomial form. Available at: <https://burcat.technion.ac.il/> (accessed May 15, 2020).
17. Chemical Workbench 4.2. Available at: <http://www.kintechlab.com/products/chemical-workbench/> (accessed May 15, 2020).
18. OpenFOAM release v1712, Available at: <https://www.openfoam.com/> (accessed May 15, 2020).