

## **Аннотация**

Целью данной работы является изучение принципа работы квадрупольного масс-спектрометра, а также знакомство с методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии и его применение для измерения состава продуктов горения. В данной работе этим методом был исследован состав основных продуктов горения в пламени метана, стабилизированного на плоской горелке. Измерены интенсивности пиков масс, соответствующих реагентам ( $\text{CH}_4$  и  $\text{O}_2$ ) и таким продуктам горения, как  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ . Профили молярных долей соединений в пламени получены из профилей интенсивности соответствующих массовых пиков с помощью метода отношения сечений ионизации и на основе уравнений материального баланса.

Ключевые слова: квадрупольный масс-спектрометр, пламя метана, молекулярно-пучковая масс-спектрометрия, профили молярных долей соединений.

## Оглавление

|       |                                      |    |
|-------|--------------------------------------|----|
| 1     | Введение.....                        | 4  |
| 2     | Теоретическая часть.....             | 4  |
| 2.1   | Масс-спектрометрия.....              | 4  |
| 2.2   | Квадрупольный масс-спектрометр ..... | 6  |
| 2.2.1 | Ионизация электронным ударом .....   | 6  |
| 2.2.2 | Квадрупольный масс-анализатор .....  | 7  |
| 3     | Экспериментальная часть.....         | 8  |
| 3.1   | Экспериментальная установка .....    | 8  |
| 3.2   | Методика обработки результатов ..... | 11 |
| 3.3   | Результаты эксперимента .....        | 12 |
| 3.4   | Обработка и анализ результатов ..... | 12 |
| 4     | Выводы .....                         | 15 |
| 5     | Литература .....                     | 15 |
| 6     | Приложение 1 .....                   | 16 |
| 7     | Приложение 2 .....                   | 17 |

## 1 Введение

Метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии (МППМС) находит широкое применение при изучении процессов горения. Он позволяет регистрировать не только стабильные соединения, но и радикалы. Метод позволяет измерять пространственное распределение их концентраций в пламени. Эти данные необходимы для тестирования моделей горения.

Целью работы являлось изучение принципа работы квадрупольного масс-спектрометра с ионизацией электронным ударом, а также знакомство с методом молекулярно-пучковой масс-спектрометрии и измерение с его помощью состава продуктов горения в пламени метана при атмосферном давлении.

## 2 Теоретическая часть

### 2.1 Масс-спектрометрия

**Масс-спектрометрия** - физический метод анализа состава вещества, основанный на измерении отношения массы заряженных частиц (ионов) к их заряду. Для измерения массы частиц (или вернее отношения массы к заряду  $m/e$ ) в данном методе используются различия в движении заряженных частиц с разными массами в магнитном или электрическом полях. Принцип масс-спектрометрического анализа основан на измерении интенсивностей ионных токов, величины которых пропорциональны концентрациям компонент в пробе.

Масс-спектрометр представляет собой сложное устройство, для рассмотрения принципов работы которого удобно его разбить на структурные блоки и представить в виде блок-схемы (рис.1). Основные элементы масс-спектрометра: система подачи исследуемой пробы; источник ионов, где вещество частично ионизуется и происходит формирование ионного пучка; система транспорта ионов от источника к масс-анализатору; масс-анализатор, в котором происходит разделение ионов по массам, точнее, обычно по величине отношения массы  $m$  иона к его заряду  $e$ ; детектор ионов; система регистрации и обработки экспериментальной информации; система управления масс-спектрометром. Масс-спектрометр содержит также системы электрического

питания и устройства, создающие и поддерживающие высокий вакуум в ионном источнике и анализаторе.

#### Принцип работы масс-спектрометра:

- Пробу вводят в источник ионизации, где молекулы ионизируются;
- Образующиеся положительные ионы выводятся из зоны ионизации, ускоряются электрическим полем и одновременно фокусируются в пучок.

Нейтральные молекулы удаляются вакуумным насосом;

- Поток ускоренных ионов попадает в масс-анализатор, где ионы разделяются по массе;
- Разделенные пучки ионов попадают в

детектор, где ионный ток преобразуется в электрический сигнал, который усиливается и регистрируется.

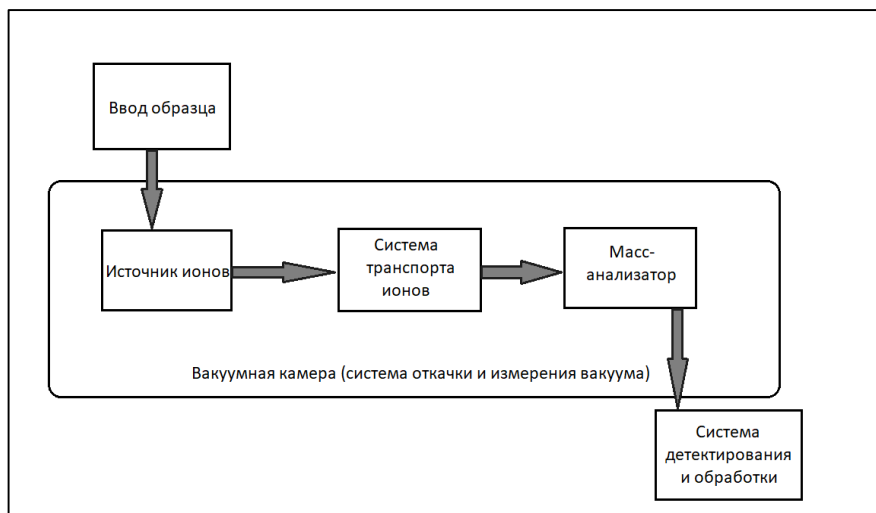


Рисунок 1. Блок-схема масс-спектрометра

**Масс-спектр** – это зависимость интенсивности ионного тока (или количества ионов, зарегистрированных детектором в единицу времени) от отношения массы к заряду  $m/e$ .

Как было сказано выше, в масс-спектрометрии работают с веществом, находящимся в ионизированном состоянии. При исследовании газовой фазы обычно используется электронная ионизация или фотоионизация.

Масс-спектрометры различаются по типу масс-анализатора, т.е. по способу разделения ионов по массам. Существуют различные виды масс-анализаторов, но в данной работе использовался квадрупольный масс-анализатор.

## 2.2 Квадрупольный масс-спектрометр

В данной работе применяется квадрупольный масс-спектрометр с мягкой ионизацией электронным ударом. Такие приборы получили широкое распространение благодаря своей высокой скорости сканирования, чувствительности и относительно невысокой стоимости.

### 2.2.1 Ионизация электронным ударом

Для ионизации вещества используется поток электронов с высокой энергией. На рисунке 2 приведена схема типичной установки, применяемой для этих целей. Источником электронов является нагретая металлическая проволока (катод). Электроны, покидающие поверхность катода, разгоняются электрическим полем по направлению к аноду. Путь электронов проходит через объем, занятый анализируемым веществом, предварительно переведенным в газообразное состояние (в ионизационной камере поддерживается разряжение  $10^{-5} - 10^{-6}$  мм рт. ст.), с молекулами которого происходит взаимодействие, заключающееся в передаче

энергии. Начиная с определенных значений энергии (энергия ионизации), возбуждение заканчивается потерей одного или нескольких электронов с образованием

положительного иона  $M^+$ , а

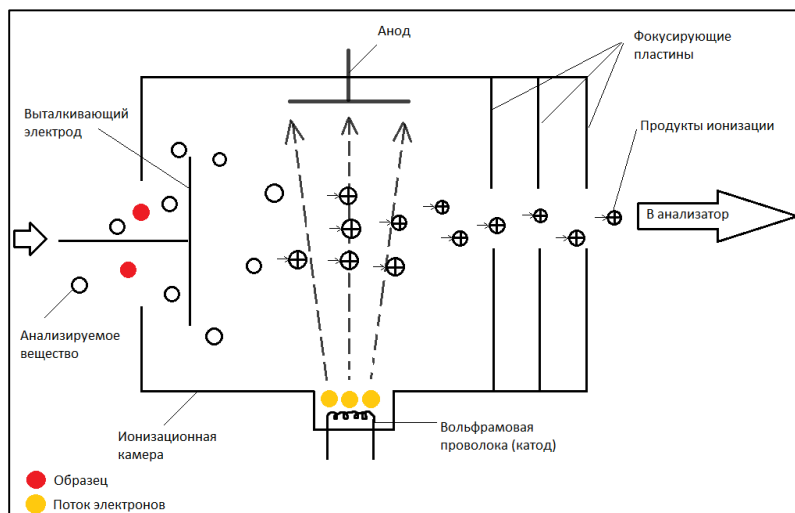


Рисунок 2. Ионизация электронным ударом

также, в зависимости от энергии ионизирующих электронов, может произойти разрыв связей в ионизируемой молекуле (фрагментация).



Образующиеся катион-радикалы выталкиваются специальным электродом из ионизационной камеры и после фокусировки в узкий пучок

направляются в анализатор. Для достижения ионного детектора каждому иону требуется в среднем не более  $2 \times 10^{-5}$  с.

Важным параметром является энергия ионизирующих электронов. Стандартные масс-спектры EI принято снимать, используя электроны с энергией 70 эВ, что соответствует ускоряющему потенциалу между катодом и анодом в 70 В. Выбор такой энергии не случаен. Во-первых, при этом достигается максимальная эффективность ионизации и, во-вторых, только в этом случае получается воспроизводимый масс-спектр.

В данной работе ионизация пробы осуществлялась электронами с энергией от ~12 до ~17 эВ, то есть незначительно превышающий потенциал ионизации большинства химических соединений (который обычно составляет от 8 до 14 эВ). Хотя при этих энергиях величина ионного тока намного ниже, чем при 70 эВ, вероятность появления осколочных ионов при этом тоже существенно ниже. Учитывая, что в пробе из пламени может содержаться одновременно более сотни соединений, использование мягкой ионизации значительно облегчает их идентификацию.

Масс-спектрометр регистрирует лишь положительные ионы, а отрицательные ионы, нейтральные радикалы и молекулы не регистрируются.

### **2.2.2 Квадрупольный масс-анализатор**

Квадрупольный анализатор состоит из четырех параллельных стержней круглого или гиперболического сечения, к которым попарно в противоположной полярности приложены переменное напряжение вида  $V \cos(\omega t)$  и постоянное напряжение  $U$  (Рис.3).

Попав в анализатор, положительно заряженный ион будет двигаться к отрицательно заряженному стержню, однако, если до того, как он достигнет стержень, полярность последнего изменится, ион изменит направление движения. В результате, под действием электрического поля ионы, вводимые в квадруполь, начинают колебаться относительно осей  $x$  и  $y$ . Так как каждый ион имеет свою собственную частоту колебаний, зависящую от массы, через анализатор проходят лишь те из них, частота которых находится в резонансе с радиочастотой квадруполя, остальные гибнут на поверхности стержней. Из-за этой особенности квадруполя его еще называют фильтром масс. Прошедшие анализатор ионы регистрируются детектором. Поскольку величина  $m/e$  зависит от радиочастотной составляющей, ее постепенное изменение позволяет просканировать всю рабочую область  $m/e$  и получить масс-спектр.

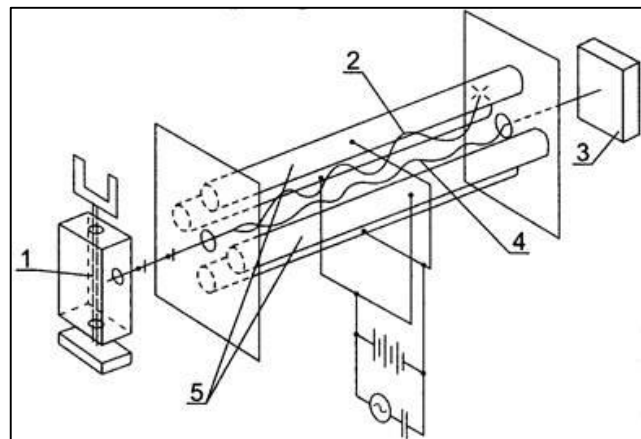


Рисунок 3. Схема квадрупольного масс-спектрометра: 1 – пучок ионизирующих электронов, 2 – нерезонирующие ионы, 3 – коллектор ионов, 4 – резонирующие ионы, 5 – стержни

### 3 Экспериментальная часть

#### 3.1 Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки приведена на рис.4. Исследуемое пламя стабилизировалось на плоской горелке Бота-Сполдинга (рис.5) при атмосферном давлении. Горелка представляла собой латунный диск с отверстиями (диаметр отверстий 0.5 мм, расстояние между центрами 0.7 мм) диаметром 16 мм и толщиной 3 мм, закрепленный в латунном корпусе, снабженном водяной рубашкой. Корпус горелки был заполнен шариками из нержавеющей стали диаметром 3 мм, что обеспечивало равномерную скорость потока горючей смеси по всей поверхности горелки, а также прогрев горючей



Рисунок 4. Схема установки

смеси по всей поверхности горелки. Температура воды, пропускаемой через водяную рубашку, поддерживалась равной  $95^{\circ}\text{C}$  с помощью термостата.

Концентрации газовых компонентов горючих смесей задавались с помощью регуляторов массового расхода газа (MKS Instruments Inc.). Исследовалось бедное пламя метана  $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$  (0.06/0.15/0.79) с коэффициентом избытка горючего ( $\phi = 0.8$ ). Скорость потока исходной горючей смеси поддерживалась равной  $25\text{ см}^3/\text{с}$ .

Распределение концентраций компонентов в пламенах в зависимости от расстояния до поверхности горелки были измерены на МПМС-установке в лаборатории кинетики процессов горения. В качестве пробоотборника (рис.6) применялся тонкостенный кварцевый конус. Внутренний угол конуса  $40^\circ$  и диаметр отверстия при вершине 0.04

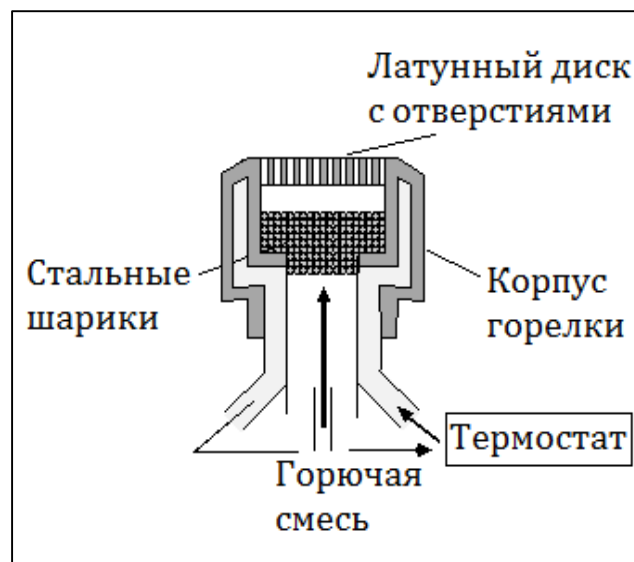


Рисунок 6. Схема горелки

мм, толщина стенки вблизи кончика составляла 0.08 мм. При расширении газа в вакуум за пробоотборником в камере 1 формировался молекулярный пучок. Эта камера откачивалась диффузионным насосом производительностью 1100 л/с до давления  $10^{-3}$  мм.рт.ст. Центральная невозмущенная часть молекулярного пучка вырезалась с помощью скиммера, выполненного из нержавеющей стали,

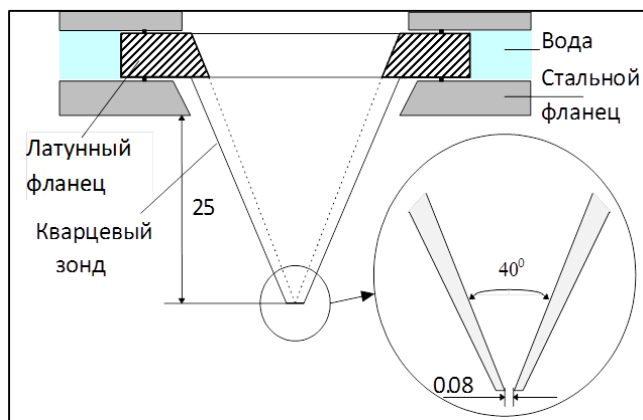


Рисунок 5. Схема пробоотборника.

и направлялась в вакуумную камеру 2, которая откачивалась турбомолекулярным насосом производительностью 500 л/с до давления  $10^{-5}$  мм.рт.ст. Далее молекулярный пучок проходил через коллиматор в камеру ионного источника масс-спектрометра, где

также происходила откачка турбомолекулярным насосом производительностью 500 л/с до давления  $10^{-7}$  мм.рт.ст.

Установка оборудована квадрупольным масс-спектрометром МС-7302 с мягкой ионизацией электронным ударом (разброс по энергиям электронов составляет около  $\pm 0.25$  эВ). При измерении интенсивности массовых пиков энергия ионизации устанавливалась индивидуально для каждого исследуемого

вещества такой, чтобы, с одной стороны, она была выше потенциала ионизации вещества и имела при этом приемлемое соотношение сигнал/шум, а с другой стороны, была не слишком высокой, чтобы не допустить или, по крайней мере, минимизировать вклад от осколочных ионов других соединений.

### 3.2 Методика обработки результатов

Профили молярных долей соединений пламени получены из профилей интенсивности, соответствующих массовым пикам следующим образом. Сначала все профили интенсивности были нормированы на профиль интенсивности, соответствующий аргону – основному компоненту пламени. Это было сделано для того, чтобы избавиться от зависимости получаемых сигналов от температуры по зоне пламени. Молярные доли соединений определялись методом отношения сечений ионизации и с помощью уравнений материального баланса.

Сущность метода состоит в следующем. Как известно, интенсивность сигнала ( $I_i$ ), соответствующая  $i$ -му соединению при температуре  $T$ , связана с молярной долей ( $X_i$ ) этого соединения через калибровочный коэффициент ( $S_i$ ):

$$I_i = S_i(T)X_i \quad (9)$$

Калибровочный коэффициент можно представить в виде

$$S_i(T) = A\sigma_i(E)D(m)F(T, p), \quad (10)$$

где  $A$  – константа;  $\sigma_i(E)$  – эффективное сечение ионизации  $i$ -го соединения при энергии электронов  $E$ ;  $D(m)$  – коэффициент, который характеризует зависимость чувствительности МПМС-установки от массы детектируемых электронов, обусловленную тем, что центральная часть молекулярного пучка может быть обогащена более тяжелыми частицами за счет бародиффузии;  $F(T, p)$  – эмпирическая функция, которая устанавливает зависимость плотности молекулярного пучка в области ионизации от давления в пламени  $p$  и локальной температуры  $T$ . Функция  $F(T, p)$  определяется геометрией и газодинамическими характеристиками системы пробоотбора (зонда и

скиммера), поэтому она одинакова для всех частиц пробы. Из выражений (9) и (10) для двух соединений ( $i$ -го и  $j$ -го) можно получить соотношение:

$$\frac{I_i}{I_j} = \frac{\sigma_i(E_i)D(m_i)X_i}{\sigma_j(E_j)D(m_j)X_j} \quad (11)$$

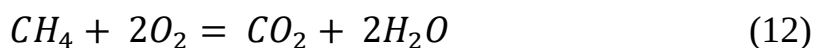
Зная интенсивности сигналов, соответствующие двум соединениям, а также молярную долю одного из этих соединений в определенной точке пламени, используя соотношение (11), можно вычислить молярную долю другого соединения в той же точке пламени. В наших вычислениях эффективное сечение ионизации для соединений при заданной энергии ионизирующих электронов были рассчитаны с использованием базы данных NIST (National Institute of Standards and Technology, USA) по сечениям ионизации электронным ударом. На основе прошлых работ в данном исследовании в пределах погрешности измерения можно считать, что  $D(m_i)/D(m_j) \approx 1$  для всех соединений близких масс.

### 3.3 Результаты эксперимента

В результате эксперимента были получены интенсивности различных массовых пиков, в зависимости от расстояния над горелкой (профили интенсивности сигналов). В приложении 1 представлены профили интенсивностей сигналов, соответствующих различным соединениям, уже нормированные на профиль интенсивности, соответствующий аргону. Погрешность измерения интенсивности пиков масс зависит от фонового сигнала, а также от концентрации соединений, однако для всех пиков она не превышала  $\pm 15\%$ .

### 3.4 Обработка и анализ результатов

Реакция горения метана:



Вначале, пользуясь формулой (9), были определены профили молярных долей для  $CH_4$  и  $O_2$ . Затем по уравнениям материального баланса для элементов С (13) и Н (14) были найдены концентрации  $CO_2$  и  $H_2O$  в зоне конечных

продуктов, исходя из которых определялись профили молярных долей для  $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ .

$$X_{\text{CH}_4} = X_{\text{CO}_2} \quad (13)$$

$$X_{\text{CH}_4} = \frac{1}{2} X_{\text{H}_2\text{O}} \quad (14)$$

В работе было измерено два соединения с одинаковым отношением массы к заряду ( $\text{CO}$  и  $\text{C}_2\text{H}_4$ ) при разных энергиях. Энергия ионизации этилена ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ) 10,5 эВ, а монооксида углерода ( $\text{CO}$ ) – 14,01 эВ. Мы измеряли данные соединения, как видно из таблицы при энергии ионизирующих электронов 12,3 эВ и 14,35 эВ соответственно. Это значит, что сигнал интенсивности  $I_{28}(14,35)$ , полученный при энергии 14,35 эВ на самом деле включает в себя суммарную интенсивность этилена и монооксида углерода при 14,35 эВ. Поэтому, интенсивность  $\text{CO}$  при 14,35 эВ вычислялась по формуле:

$$I_{\text{CO}}(14,35) = I_{28}(14,35) - I_{\text{C}_2\text{H}_4}(14,35). \quad (15)$$

$I_{\text{C}_2\text{H}_4}(14,35)$  можем найти из соотношения сечений ионизации для разных энергий, тогда формула (15) примет вид:

$$I_{\text{CO}}(14,35) = I_{28}(14,35) - I_{\text{C}_2\text{H}_4}(12,3) \frac{\sigma_{\text{C}_2\text{H}_4}(14,35)}{\sigma_{\text{C}_2\text{H}_4}(12,3)} \quad (16)$$

По формуле (16) находим интенсивность  $\text{CO}$  при 14,5 эВ.

Используя найденную молярную долю  $X_{\text{CO}_2}$ , были найдены по формуле (9) калибровочные коэффициенты  $S_{\text{CO}_2}$  для  $\text{CO}_2$ , которые использовались для нахождения калибровочных коэффициентов  $S_{\text{CO}}(14,35)$  по формуле (она получается из формул 9, 10 и 11):

$$\frac{S_{\text{CO}}(14,35)}{S_{\text{CO}_2}(15,4)} = \frac{\sigma_{\text{CO}}(14,35)}{\sigma_{\text{CO}_2}(15,4)}. \quad (17)$$

После того как найдем  $S_{\text{CO}}(14,35)$  и  $I_{\text{CO}}(14,35)$ , можно найти  $X_{\text{CO}}$  по формуле (9). Аналогично формуле (17) можно найти  $X_{\text{C}_2\text{H}_4}$ .

В результате всех этих вычислений были получены профили молярных долей таких соединений, как  $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{C}_2\text{H}_4$ , представленные в приложении 2 в виде таблицы.

На основе этих данных были построены зависимости концентраций реагентов ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ) и основных продуктов ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ) от расстояния над горелкой, которые представлены на рис.7. Отдельно вынесены графики для  $\text{C}_2\text{H}_4$  (рис.8) и  $\text{CO}$  (рис.9), т.к. их концентрация мала. Также для самопроверки были построены графики материального баланса для Н, О и С (рис.10). Видно, что на расстоянии от 0,5 до 2 мм наблюдается отклонение от баланса (недосток Н, С и О), что связано с тем, что в зоне пламени были измерены не все соединения, содержащие водород, кислород и углерод.

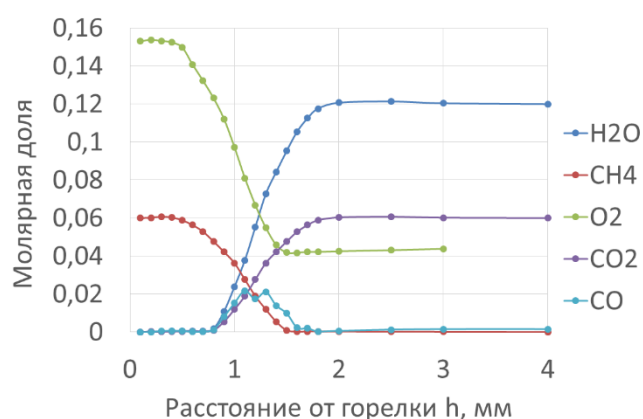


Рисунок 7. Профили концентраций реагентов и основных продуктов в пламени метана

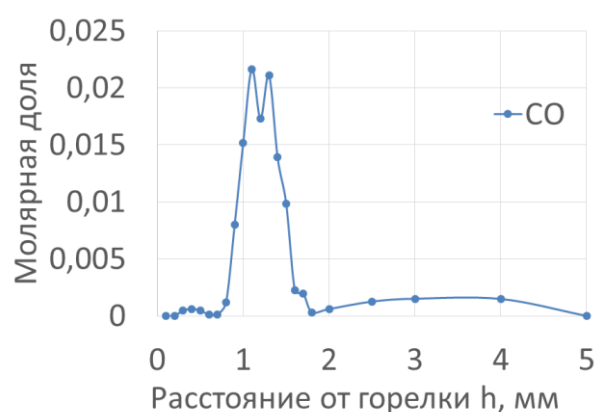


Рисунок 9. Профиль концентрации монооксида углерода



Рисунок 8. Профиль концентрации этилена

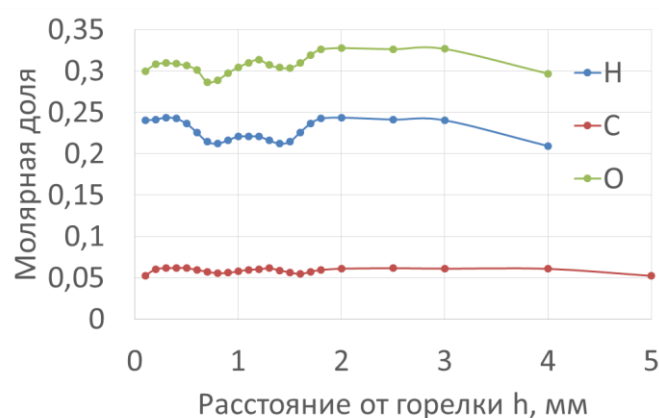


Рисунок 10. Материальный баланс по С, Н, О в пламени

#### 4 Выводы

В данной работе был изучен принцип работы квадрупольного масс-спектрометра и метод молекулярно-пучковой масс-спектрометрии для исследования процессов горения. Используя данный метод, были измерены интенсивности пиков масс в бедном пламени метана, на основе которых были получены зависимости мольных долей реагентов ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ), основных ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ) и промежуточных продуктов горения ( $\text{CO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ) от высоты над горелкой.

#### 5 Литература

1. И. Е. Герасимов, Д. А. Князьков, С. А. Якимов, Т.А. Большова, А. Г. Шмаков, О. П. Коробейничев. «Влияние этанола на химию образования предшественников полиароматических углеводородов в богатом пламени этилена при атмосферном давлении», Физика горения и взрыва, 2012, т. 48, №6. Институт химический кинетики и горения СО РАН, Новосибирск, Россия.
2. Ф. Р. Вестмореланд, М. Е. Ло, Т. А. Кул, Цз. Ван, Э. Макилрой, К. А. Таатъес, Н. Хансен, «Изучение структуры пламени методом МПМС с применением ионизации электронным ударом и фотонной ионизации синхротронным излучением», Физика горения и взрыва, 2006, т.42, №6. Массачусетский университет, Массачусетс, США.
3. <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Ionization/molTable.html> (база данных NIST (National Institute of Standards and Technology, USA))
4. [https://site-285580.mozfiles.com/files/285580/lab\\_MS\\_2012.pdf](https://site-285580.mozfiles.com/files/285580/lab_MS_2012.pdf)
5. <http://window.edu.ru/resource/361/70361/files/rsu745.pdf>

## 6 Приложение 1

| Компонент                                      | Водород        | Метан           | Вода             | Этилен                                                                | Монооксид углерода + этилен        | Кислород       | Аргон | Диоксид углерода |
|------------------------------------------------|----------------|-----------------|------------------|-----------------------------------------------------------------------|------------------------------------|----------------|-------|------------------|
| Формула                                        | H <sub>2</sub> | CH <sub>4</sub> | H <sub>2</sub> O | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>                                         | CO + C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> | O <sub>2</sub> | Ar    | CO <sub>2</sub>  |
| m/e                                            | 2              | 16              | 18               | 28                                                                    | 28                                 | 32             | 40    | 44               |
| Энергия ионизирующих электронов, эВ            | 18             | 14,35           | 15,4             | 12,3                                                                  | 14,35                              | 14,35          | 16,2  | 15,4             |
| Сечение ионизации $\sigma(E)$ , Å <sup>2</sup> | 0,157          | 0,018           | 0,143            | $\sigma_{C_2H_4}(12,3) = 0,237$ ;<br>$\sigma_{C_2H_4}(14,35) = 0,541$ | $\sigma_{CO}(14,35) = 0,016$ ;     | 0,02           | -     | 0,13             |
| Расстояние от горелки, мм                      | Интенсивность  |                 |                  |                                                                       |                                    |                |       |                  |
| 0,1                                            | 0,001510327    | 0,052319256     | 0,001950217      | 0,000108461                                                           | 0,00028982                         | 0,217892018    | 1     | 0,001166858      |
| 0,2                                            | 0,001693065    | 0,052282815     | 0,001462663      | 7,23072E-05                                                           | 0,000193213                        | 0,216968034    | 1     | 0,003557823      |
| 0,3                                            | 0,002232014    | 0,052467416     | 0,00117013       | 0                                                                     | 0,001276474                        | 0,222349551    | 1     | 0,003146298      |
| 0,4                                            | 0,002037735    | 0,05288478      | 0,002782403      | 2,27302E-05                                                           | 0,001083261                        | 0,223227844    | 1     | 0,003488942      |
| 0,5                                            | 0,002422375    | 0,052589256     | 0,002774469      | 2,27302E-05                                                           | 0,001083261                        | 0,222545708    | 1     | 0,004821563      |
| 0,6                                            | 0,004004271    | 0,05125493      | 0,005414561      | 8,04403E-05                                                           | 0,00051362                         | 0,221283476    | 1     | 0,007482525      |
| 0,7                                            | 0,005133761    | 0,049049363     | 0,010416272      | 5,77101E-05                                                           | 0,000817978                        | 0,217487441    | 1     | 0,007154547      |
| 0,8                                            | 0,00485561     | 0,045978434     | 0,012651051      | 0,000136684                                                           | 0,001976269                        | 0,204296877    | 1     | 0,010012486      |
| 0,9                                            | 0,003835707    | 0,041535716     | 0,020472533      | 0,000147949                                                           | 0,00295091                         | 0,191972981    | 1     | 0,014365142      |
| 1                                              | 0,002942487    | 0,036746959     | 0,025905363      | 0,000283814                                                           | 0,003706297                        | 0,178727089    | 1     | 0,019408726      |
| 1,1                                            | 0,003627575    | 0,031651462     | 0,03419201       | 0,000416325                                                           | 0,004609993                        | 0,162852414    | 1     | 0,025963526      |
| 1,2                                            | 0,004035851    | 0,024054418     | 0,046807737      | 0,000564466                                                           | 0,004961919                        | 0,14129814     | 1     | 0,047592434      |
| 1,3                                            | 0,004580397    | 0,016484183     | 0,066204926      | 0,000531308                                                           | 0,006493318                        | 0,117690364    | 1     | 0,073916311      |
| 1,4                                            | 0,004206073    | 0,010347988     | 0,078924971      | 0,000319822                                                           | 0,004855729                        | 0,097059733    | 1     | 0,101627368      |
| 1,5                                            | 0,002696855    | 0,004719744     | 0,098353204      | 0,000102707                                                           | 0,003498382                        | 0,079808283    | 1     | 0,128458881      |
| 1,6                                            | 0,001103433    | 0,000759365     | 0,110048134      | 4,36613E-05                                                           | 0,000907237                        | 0,066529374    | 1     | 0,152395685      |
| 1,7                                            | 0,000707979    | 0,000167441     | 0,120245774      | 6,10706E-05                                                           | 0,000833928                        | 0,060708516    | 1     | 0,162664069      |
| 1,8                                            | 0,001042666    | 0,000255653     | 0,123515433      | 0,000104725                                                           | 0,000351088                        | 0,060636844    | 1     | 0,166915383      |
| 2                                              | 0,001737404    | 0,000248587     | 0,129710762      | 6,10641E-05                                                           | 0,000351088                        | 0,061237536    | 1     | 0,170686143      |
| 2,5                                            | 0,001294308    | 0,000220643     | 0,134748308      | 0,000117576                                                           | 0,000711487                        | 0,061245047    | 1     | 0,17326779       |
| 3                                              | 0,001389038    | 0,000128374     | 0,139431876      | 7,39208E-05                                                           | 0,000711487                        | 0,06169705     | 1     | 0,17563393       |
| 4                                              | 0,001486037    | 0,000110265     | 0,139520997      | 7,39208E-05                                                           | 0,000711487                        | 0,062536251    | 1     | 0,17739809       |
| 5                                              | 0,001831732    | 0               | 0,144525284      | 0                                                                     | 0                                  | 0,063539815    | 1     | 0,180308839      |

Таблица 1. Интенсивности различных массовых пиков

## 7 Приложение 2

| Компонент                                      | Метан           | Вода             | Этилен                        | Моноксид углерода | Кислород       | Диоксид углерода |
|------------------------------------------------|-----------------|------------------|-------------------------------|-------------------|----------------|------------------|
| Формула                                        | CH <sub>4</sub> | H <sub>2</sub> O | C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> | CO                | O <sub>2</sub> | CO <sub>2</sub>  |
| m/e                                            | 16              | 18               | 28                            | 28                | 32             | 44               |
| Энергия ионизирующих электронов, эВ            | 14,35           | 15,4             | 12,3                          | 14,35             | 14,35          | 15,4             |
| Сечение ионизации $\sigma(E)$ , Å <sup>2</sup> | 0,018           | 0,143            | 0,237                         | 0,016             | 0,02           | 0,13             |
| Расстояние от горелки, мм                      | Молярные доли   |                  |                               |                   |                |                  |
| 0,1                                            | 0,052319256     | 0                |                               | 0                 | 0,217892018    | 0                |
| 0,2                                            | 0,05995821      | 0,000252904      | 1,40967E-06                   | 8,13125E-06       | 0,149363916    | 0,000126452      |
| 0,3                                            | 0,06016991      | 0,00029444       | 0                             | 0,000485291       | 0,15306863     | 0,00014722       |
| 0,4                                            | 0,060648546     | 0,00050607       | 9,04245E-07                   | 0,000607753       | 0,153673259    | 0,000253035      |
| 0,5                                            | 0,060309638     | 0,000570161      | 7,37189E-07                   | 0,000495472       | 0,153203667    | 0,00028508       |
| 0,6                                            | 0,058779426     | 0,000586367      | 1,72886E-06                   | 0,000105057       | 0,152334728    | 0,000293184      |
| 0,7                                            | 0,056250069     | 0,000384044      | 8,49603E-07                   | 0,000149648       | 0,149721483    | 0,000192022      |
| 0,8                                            | 0,052728312     | 0,001741688      | 6,52098E-06                   | 0,001176096       | 0,14064091     | 0,000870844      |
| 0,9                                            | 0,047633379     | 0,010825254      | 3,05777E-05                   | 0,008000038       | 0,132156962    | 0,005412627      |
| 1                                              | 0,042141607     | 0,023734255      | 9,51869E-05                   | 0,015193969       | 0,123038299    | 0,011867128      |
| 1,1                                            | 0,036298065     | 0,037808298      | 0,000166273                   | 0,021649906       | 0,112109945    | 0,018904149      |
| 1,2                                            | 0,027585734     | 0,055171468      | 0,000179465                   | 0,01729974        | 0,097271673    | 0,027585734      |
| 1,3                                            | 0,018904149     | 0,07259613       | 0,000143115                   | 0,021068892       | 0,08101974     | 0,036298065      |
| 1,4                                            | 0,011867128     | 0,084283214      | 7,27452E-05                   | 0,013900113       | 0,066817317    | 0,042141607      |
| 1,5                                            | 0,005412627     | 0,095266758      | 2,08901E-05                   | 0,009833586       | 0,05494117     | 0,047633379      |
| 1,6                                            | 0,000870844     | 0,105456624      | 8,28633E-06                   | 0,00227026        | 0,045799779    | 0,052728312      |
| 1,7                                            | 0,000192022     | 0,112500138      | 1,1584E-05                    | 0,001951376       | 0,041792616    | 0,056250069      |
| 1,8                                            | 0,000293184     | 0,117558851      | 2,02291E-05                   | 0,000320547       | 0,041743276    | 0,058779426      |
| 2                                              | 0,00028508      | 0,120619276      | 1,1835E-05                    | 0,000607752       | 0,042156801    | 0,060309638      |
| 2,5                                            | 0,000253035     | 0,121297093      | 2,25743E-05                   | 0,001260159       | 0,042161971    | 0,060648546      |
| 3                                              | 0,00014722      | 0,12033982       | 1,3891E-05                    | 0,001510751       | 0,042473137    | 0,06016991       |
| 4                                              | 0,000126452     | 0,119916419      | 1,37044E-05                   | 0,001490464       | 0,043050855    | 0,05995821       |
| 5                                              | 0               | 0,104638512      | 0                             | 0                 | 0,043741723    | 0,052319256      |

Таблица 2. Профили молярных долей соединений