

ДЕТОНАЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ БОР- И АЛЮМИНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ В ВОЗДУХЕ, ВОДЕ И ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА*

К. А. Бырдин¹, С. М. Фролов², П. А. Стороженко³, Ш. Л. Гусейнов⁴

Аннотация: В отличие от традиционных силовых установок на химическом топливе, основанных на управляемом дозвуковом горении топлива в камере сгорания, рабочий процесс в прямоточных импульсно-детонационных двигателях (ИДД) и непрерывно-детонационных двигателях (НДД) основан на управляемом сверхзвуковом горении топлива в набегающем потоке окислительной среды в импульсных и непрерывных волнах детонации соответственно. Один из ключевых вопросов при проектировании и эксплуатации ИДД и НДД — выбор топлива, обладающего приемлемой детонационной способностью (ДС) в той или иной окислительной среде, требуемой для устойчивого и энергоэффективного рабочего процесса. В статье представлены результаты термодинамических расчетов параметров детонации бор- и алюминий-содержащих соединений (B , B_2H_6 , B_5H_9 , $B_{10}H_{14}$, Al , AlH_3 , $Al(C_2H_5)_3$ и $Al(CH_3)_3$) в воздухе, воде и диоксиде углерода. Полученные результаты демонстрируют потенциальную возможность использования рассматриваемых соединений в качестве топлив для перспективных транспортных средств с ИДД и НДД, работающих в атмосфере Земли (воздух), в воде и в атмосферах Марса и Венеры (CO_2). Для проверки достоверности полученных результатов проведено сравнение расчетных скоростей детонации диборана, алюминия и изопропилнитрата в воздухе с литературными экспериментальными данными.

Ключевые слова: прямоточный реактивный двигатель; импульсно-детонационный двигатель; непрерывно-детонационный двигатель; термодинамический расчет; скорость детонации; детонационная способность; окислительная среда (воздух, вода, CO_2); бор; диборан; пентаборан; декаборан; алюминий; гидрат алюминия; триэтилалюминий; триметилалюминий; изопропилнитрат

DOI: 10.30826/CE23160205

EDN: DUZAPT

Литература

- Roy G. D., Frolov S. M., Borisov A. A., Netzer D. W. Pulse detonation propulsion: Challenges, current status, and future perspective // Prog. Energ. Combust., 2004. Vol. 30. No. 6. P. 545–672.
- Anand V., Gutmark E. Rotating detonation combustors and their similarities to rocket instabilities // Prog. Energ. Combust., 2019. Vol. 73. P. 182–234.
- Vykovskii F. A., Zhdan S. A., Vedernikov E. F. Continuous spin detonations // J. Propul. Power, 2006. Vol. 22. No. 6. P. 1204–1216. doi: 10.2514/1.17656.
- Ivanov V. S., Frolov S. M., Zangiev A. E., Zvegintsev V. I., Shamshin I. O. Hydrogen fueled detonation ramjet: Conceptual design and test fires at Mach 1.5 and 2.0 // Aerosp. Sci. Technol., 2021. Vol. 109. P. 106459. doi: 10.1016/j.ast.2020.106459.
- Frolov S. M., Platonov S. V., Avdeev K. A., Aksenov V. S., Ivanov V. S., Zangiev A. E., Sadykov I. A., Tukhvatullina R. R., Frolov F. S., Shamshin I. O. Pulsed combustion of fuel–air mixture in a cavity above water surface: Modeling and experiments // Shock Waves, 2022. Vol. 32. No. 1. P. 1–10. doi: 10.1007/s00193-021-01045-3.
- Frolov S. M., Platonov S. V., Avdeev K. A., Aksenov V. S., Ivanov V. S., Zangiev A. E., Sadykov I. A., Tukhvatullina R. R., Frolov F. S., Shamshin I. O. Pulsed combustion of fuel–air mixture in a cavity under the boat bottom: Modeling and experiments // Shock Waves, 2022. Vol. 32. No. 1. P. 11–24. doi: 10.1007/s00193-021-01046-2.
- Frolov S. M., Avdeev K. A., Aksenov V. S., Frolov F. S., Sadykov I. A., Shamshin I. O., Tukhvatullina R. R. Pulsed detonation hydroramjet: Simulations and experiments // Shock Waves, 2020. Vol. 30. No. 3. P. 221–234. doi: 10.1007/s00193-019-00906-2.

* Работа выполнена за счет субсидии, предоставленной ФИЦ ХФ РАН на выполнение государственного задания с регистрационным номером 122040500073-4, и субсидии, предоставленной ФГУ «Научно-исследовательский институт системных исследований РАН» для выполнения государственного задания по теме № ФНЭФ-2022-0005 (регистрационный № 1021060708369-1-1.2.1).

¹ Федеральное исследовательское учреждение «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, byrdin_kirill@mail.ru

² Федеральное исследовательское учреждение «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

³ АО «Государственный Орден Трудового Красного Знамени научно-исследовательский институт химии и технологии элементарных органических соединений», bigpastor@mail.ru

⁴ АО «Государственный Орден Трудового Красного Знамени научно-исследовательский институт химии и технологии элементарных органических соединений», rejhan@bk.ru

8. Frolov S. M., Avdeev K. A., Aksenov V. S., Frolov F. S., Sadykov I. A., Shamshin I. O. Pulsed detonation hydro-ramjet: Design optimization // J. Marine Science Engineering, 2022. Vol. 10. P. 1171. doi: 10.3390/jmse10091171.
9. Соколик А. С., Щёлкин К. И. Распространение пламени в смесях метана с кислородом в закрытых трубах // Ж. физ. химии, 1933. Т. 4. № 1. С. 109–128.
10. Соколик А. С., Щёлкин К. И. Детонационная способность кислородных смесей углеводородов жирного ряда и ароматических // Ж. физ. химии, 1933. Т. 4. № 2. С. 129–131.
11. Щёлкин К. И. Влияние шероховатости трубы на возникновение и распространение детонации в газах // Ж. эксп. теор. физ., 1940. Т. 10. № 7. С. 823–827.
12. Lee J. H. S. The detonation phenomenon. — New York, NY, USA: The Cambridge University Press, 2008. 400 p.
13. Фролов С. М., Гельфанд Б. Е. О предельном диаметре распространения газовой детонации в трубах // Докл. Акад. наук СССР, 1990. Т. 312. № 5. С. 1177–1180.
14. Frolov S. M., Zvegintsev V. I., Aksenov V. S., Bilera I. V., Kazachenko M. V., Shamshin I. O., Gusev P. A., Belotserkovskaya M. S. Detonability of fuel–air mixtures // Shock Waves, 2020. Vol. 30. Iss. 7–8. P. 721–739. doi: 10.1007/s00193-020-00966-9.
15. Frolov S. M., Shamshin I. O., Kazachenko M. V., Aksenov V. S., Bilera I. V., Ivanov V. S., Zvegintsev V. I. Polyethylene pyrolysis products: Their detonability in air and applicability to solid-fuel detonation ramjets // Energies, 2021. Vol. 14. P. 820. doi: 10.3390/en14040820.
16. Розинг В., Харитон Ю. Прекращение детонации взрывчатых веществ при малых диаметрах заряда // Докл. Акад. наук СССР, 1940. Т. 26. № 4. С. 360–364.
17. Афанасьев Г. Т., Бедов В. И., Сергиенко О. И. Детонационная способность твердых ВВ при высокой плотности // Физика горения и взрыва, 1981. Т. 17. № 2. С. 158–159.
18. Пепекин В. И., Корсунский Б. Л., Денисаев А. А. Возбуждение взрыва твердых взрывчатых веществ при механическом воздействии // Физика горения и взрыва, 2008. Т. 44. № 5. С. 101–105.
19. Пепекин В. И. Критерий оценки чувствительности органических взрывчатых веществ // Горение и взрыв, 2010. Т. 3. № 3. С. 286–291.
20. Nettleton M. A. Gaseous detonations: Their nature, effects and control. — London: Chapman and Hall, 1987. 255 p.
21. Risha G. A., Son S. F., Yetter R. A., Yang V., Tappan B. C. Combustion of nano-aluminum and liquid water // P. Combust. Inst., 2007. Vol. 31. P. 2029–2036. doi: 10.1016/j.proci.2006.08.056.
22. Eisen N. E., Gany A. Investigation of a marine water-breathing hybrid ram-rocket motor // J. Propul. Power, 2022. Vol. 38. No. 3. doi: 10.2514/1.B38590.
23. Zubrin R. Diborane/CO₂ rockets for use in Mars ascent vehicles // JBIS — J. Brit. Interpla., 1995. Vol. 48. P. 387–390.
24. Shafirovich E., Goldshleger U. Comparison of potential fuels for Martian rockets using CO₂ // 32nd Joint Propulsion Conference and Exhibit Proceedings, 1996.
25. Miller T., Herr J. Green rocket propulsion by reaction of Al and Mg powders and water. AIAA Paper No. 2004-4037, 2004. doi: 10.2514/6.2004-4037.
26. Xiang D., Rong J., He X., Feng Z. Underwater explosion performance of RDX/AP-based aluminized explosives // Cent. Eur. J. Energ. Mat., 2017. Vol. 14. No. 1. P. 60–76. doi: 10.22211/cejem/68443.
27. Liu J., An F.-J., Wu C., Liao S.-S., Zhou M., Xue D. The early responses of air-backed plate subjected to underwater explosion with aluminized explosives // Defence Technology, 2020. Vol. 16. No. 3. P. 642–650. doi: 10.1016/j.dt.2019.11.003.
28. Shan F., He Y., Wang H., Gao Z., Chen P., Fang Z., Pan X., Jiao J. Influence of afterburn reaction on the underwater explosion of aluminized explosives // J. Appl. Phys., 2022. Vol. 132. P. 194701. doi: 10.1063/5.0125368.
29. Benson G. E., Genco R. S., Gerstein M. A preliminary experimental and analytical evaluation of diborane as a ramjet fuel. Research Memorandum No. NACA-RM-E50J04, 1950. 40 p.
30. Kaufman W. B., Gibbs J. B., Branstetter J. R. Preliminary investigation of combustion of diborane in a turbojet combustor. Research Memorandum No. NACA-RM-E52L15, 1957. 29 p.
31. Olson W. T., Breitwieser R., Gibbons L. C. A review of NACA research through 1954 on boron compounds as fuels for jet aircraft (Project Zip). Research Memorandum No. NACA-RM-E55B01. 1957. 41 p.
32. Seedhouse E. SpaceX: Starship to Mars — the first 20 years. — 2nd ed. — Cham, Switzerland: Springer, 2022. 231 p.
33. Billig F. S. A study of combustion in supersonic streams. — University of Maryland, 1964. D.Sc. Diss. 68 p.
34. Фролов С. М., Шамшин И. О., Аксёнов В. С., Казаченко М. В., Гусев П. А. Ранжирование газовых топливно-воздушных смесей по их детонационной способности с помощью эталонной импульсно-детонационной трубы // Горение и взрыв, 2019. Т. 12. № 3. С. 78–90. doi: 10.30826/CE19120309.
35. Schalla R. L. Spontaneous ignition limits of pentaborane. — National Advisory Committee for Aeronautics, 1957. Research Memorandum No. NACA-RM-E55B03. 15 p.
36. Poling E., Simons H. P. Explosive reaction of diborane in dry and water-saturated air // Ind. Eng. Chem., 1958. Vol. 50. No. 11. P. 1695–1698.
37. Martin F. J., Kydd P. H., Browne W. G. Condensation of products in diborane–air detonations // Symposium (International) on Combustion Proceedings, 1961. Vol. 8. No. 1. P. 633–644.
38. Sample P., Simons H. P. Explosive reactions of diborane in benzene saturated air // Ind. Eng. Chem., 1958. Vol. 50. No. 11. P. 1699–1702.

39. *Whatley A. T., Pease R. N.* Observations on thermal explosions of diborane–oxygen mixtures // *J. Am. Chem. Soc.*, 1954. Vol. 76. No. 7. P. 1997–1999.
40. *Baden H. C., Bauer W. H., Wiberley S. E.* The explosive oxidation of pentaborane // *J. Phys. Chem.*, 1958. Vol. 62. No. 3. P. 331–334.
41. *Bauer W. H., Wiberley S. E.* Explosive oxidation of boranes // *Borax to boranes*. — *Advances in chemistry ser.* — American Chemical Society, 1961. Vol. 32. P. 115–126.
42. *Strauss W. A.* Investigation of the detonation in aluminum powder – oxygen mixtures // *AIAA J.*, 1968. Vol. 6. No. 9. P. 1753–1756.
43. *Tulis A. J., Selman J. R.* Detonation tube studies of aluminum particles dispersed in air // *Symposium (International) on Combustion Proceedings*, 1982. Vol. 19. No. 1. P. 655–663.
44. *Borisov A. A., Khasainov B. A., Saneev E. L., Fomin I. B., Khomik S. V., Veyssiere B.* On the detonation of aluminum suspensions in air and in oxygen // *Dynamic structure of detonation in gaseous and dispersed media / Ed. A. A. Borissov*. — *Fluid mechanics and its applications ser.* — Dordrecht: Springer, 1991. P. 215–253. doi: 10.1007/978-94-011-3548-1.
45. *Ingignoli W., Veyssiere B., Khasainov B. A.* Study of detonation initiation in unconfined aluminum dust clouds // *Gaseous and heterogeneous detonations: Science to applications / Eds. G. Roy, S. Frolov, K. Kailasanath, N. Smirnov*. — Moscow: ENAS Publ., 1999. P. 337–350.
46. *Zhang F., Grönig H., van de Ven A.* DDT and detonation waves in dust–air mixtures // *Shock Waves*, 2001. Vol. 11. No. 1. P. 53–71. doi: 10.1007/pl00004060.
47. *Zhang F., Murray S. B., Gerrard K. B.* Aluminium dust–air detonation at elevated pressures // *Shock waves*. — Berlin–Heidelberg: Springer, 2004. P. 795–800.
48. *Tulis A. J., Fochtman E. G., Heberlein D. C.* Experimental methods for assessing detonation/deflagration in pyrotechnical dusts // *7th Pyrotechnics Seminar (International) Proceedings*. — IIT Research Institute, 1980. Vol. 2. P. 859–877.
49. *Heuze O., Bauer P., Presles H. N., Brochet C.* The equation of state of detonation products and their incorporation into the Quatuor Code II // *8th Symposium (International) on Detonations Preprints*. — Albuquerque, NM, USA, 1985. P. 103–110.
50. *Федоров А. В., Тетенов Е. В.* Иницирование гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // *Физика горения и взрыва*, 1992. Т. 28. № 3. С. 83–89.
51. *Veyssiere B., Khasainov B. A.* Structure and multiplicity of detonation regimes in heterogeneous hybrid mixtures // *Shock Waves*, 1994. Vol. 4. No. 3. P. 171–186.
52. *Khasainov B. A., Veyssiere B.* Initiation of detonation regimes in hybrid two-phase mixtures // *Shock Waves*, 1996. Vol. 6. P. 9–16.
53. *Fedorov A. V., Khmel' T. A., Fomin V. M.* Non-equilibrium model of steady detonations in aluminum particles – oxygen suspensions // *Shock Waves*, 1999. Vol. 9. No. 5. P. 313–318.
54. *Benkiewicz K., Hayashi A. K.* Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen–aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement // *Shock Waves*, 2003. Vol. 13. P. 385–402.
55. *Фёдоров А. В., Хмель Т. А.* Формирование и вырождение ячеистой детонации в бидисперсных газовзвесьях частиц алюминия // *Физика горения и взрыва*, 2008. Т. 44. № 3. С. 109–120. EDN: JZGBWL.
56. *Кузнецов Н. М., Фролов С. М., Шамшин И. О., Стороженко П. А.* Кинетика взаимодействия капель триэтилалюминия с перегретым водяным паром: эксперимент, физико-химическая модель и схема химических реакций // *Горение и взрыв*, 2020. Т. 13. № 3. С. 76–81. doi: 10.30826/CE20130307.
57. *Rossi S., Dreizin E. L., Law C. K.* Combustion of aluminum particles in carbon dioxide // *Combust. Sci. Technol.*, 2001. Vol. 164. No. 1. P. 209–237. doi: 10.1080/00102200108952170.
58. *Chin C.-H., Mebel A. M., Hwang D.-Y.* Theoretical study of the reaction mechanism of boron atom with carbon dioxide // *Chem. Phys. Lett.*, 2003. Vol. 375. No. 5-6. P. 670–675. doi: 10.1016/s0009-2614(03)00964-3.
59. *Sandler S. I.* *Chemical, biochemical, and engineering thermodynamics*. — 4th ed. — Hoboken, NJ, USA: Wiley, 2006. 960 p.
60. *Reynolds W. C.* *The element potential method for chemical equilibrium analysis: Implementation in the interactive program STANJAN*. — Stanford, CA, USA: Stanford University Press, 1986. 49 p.
61. JANAF database. <https://janaf.nist.gov>.
62. *Loukhovitski B. I., Torokhov S. A., Loukhovitskaya E. E., Sharipov A. S.* DFT study of small aluminum and boron hydrides: Isomeric composition and physical properties // *Struct. Chem.*, 2018. Vol. 29. P. 49–68.
63. OpenFOAM database. <https://github.com>.
64. TERRA. <http://database.eohandbook.com/database/missionsummary.aspx?missionID=204>.
65. *Allendorf M. D., Melius C. F., Cosic B., Fontijn A.* BAC-G2 predictions of thermochemistry for gas-phase aluminum compounds // *J. Phys. Chem. A*, 2002. Vol. 106. No. 11. P. 2629–2640.
66. *Fowell P. A.* *The heat of formation of some metal alkyls and of some phosphine imines*. — Manchester, U.K.: University of Manchester, 1961. PhD Thesis.
67. *Шаулов Ю. Х., Шмырева Г. О., Тубянская В. С.* Теплота образования алюминийорганических соединений. II. Теплота образования триэтилалюминия, гидрата диизобутилалюминия и гидрата диэтилалюминия // *Ж. физ. химии*, 1965. Т. 39. № 1. С. 105–110.
68. *Fic V.* Some thermodynamic characteristics of triethylaluminum // *Chemicky Prumysl*, 1966. Vol. 16. No. 10. P. 607–610.
69. *Pawlenko S.* Zur Thermochemie der metallorganischen Verbindungen, I. Thermochemische Werte der Aluminiumalkyle // *Chem. Ber.*, 1967. Vol. 100. No. 11. P. 3591–3598.

70. *Leal J. P., Martinho Simoes J. A.* Standard enthalpy of formation of triethylaluminum // *Organometallics*, 1993. Vol. 12. No. 4. P. 1442–1444.
71. *Крупнов А. А., Погосбекян М. Ю.* Термодинамические свойства изомеров триэтилалюминия // *Горение и взрыв*, 2022. Т. 15. № 4. С. 112–122.
72. *Zhang F., Murray S. B., Gerrard K. B.* Aluminum particles–air detonation at elevated pressures // *Shock Waves*, 2006. Vol. 15. No. 5. P. 313–324.
73. *Fried L. E., Howard W. M., Souers P. C.* Cheetah 2.0 User's Manual, Rev. 5. — Livermore, CA, USA: Lawrence Livermore National Lab., 1998. Report UCRLMA-117541.
74. *Karnesky J., Pitz W. J., Shepherd J. E.* Detonation in gaseous isopropyl nitrate mixtures // Fall Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute Sandia National Laboratories. — Livermore, CA, USA, 2007. Paper 07F-40. 12 p.
75. *Curtiss L. A., Raghavachari K., Redfern P. C., Pople J. A.* Assessment of Gaussian-2 and density functional theories for the computation of enthalpies of formation // *J. Chem. Phys.*, 1997. Vol. 106. No. 3. P. 1063–1079.
76. *Волохов В. М., Зюбина Т. С., Волохов А. В., Амосова Е. С., Варламов Д. А., Лемперт Д. Б., Яновский Л. С.* Квантовохимическое моделирование углеводородных соединений с высокой энтальпией образования // *Хим. физика*, 2021. Т. 40. № 1. С. 3–15. doi: 10.31857/S0207401X21010131. EDN: KMNJDC.

Поступила в редакцию 13.03.2023