

КИНЕТИКА ОКИСЛЕНИЯ ДИБОРАНА В СМЕСЯХ С ВОЗДУХОМ*

А. М. Савельев¹, В. А. Савельева², Н. С. Титова³

Аннотация: Разработана новая кинетическая модель окисления диборана, которая основана на реакционных механизмах окисления бора и диборана, ранее описанных в литературе. Константы ряда реакций уточнены в соответствии с новыми данными, полученными с использованием методов квантовой химии. Разработанный реакционный механизм, включающий 171 реакцию с участием 29 компонентов, с разумной точностью описывает экспериментальные данные по воспламенению B_2H_6 . Механизм был использован для анализа процессов окисления диборана. Определены ключевые реакции зарождения, развития цепи и формирования конечных продуктов, включая образование метаборной кислоты HBO_2 , которая существенно замедляет образование оксида бора B_2O_3 , что может приводить к потерям тепла при горении борсодержащих топлив.

Ключевые слова: диборан; кинетический механизм; воспламенение; моделирование

DOI: 10.30826/CE19120201

Литература

1. Михайлов Б. М. Химия бороводородов. — М.: Наука, 1967. 520 с.
2. Химическая энциклопедия: В 5 т. / Под ред. И. Л. Кнунянц. — М.: Сов. Энцикл., 1988. Т. 1. 623 с.
3. Бакулин В. Н., Дубовкин Н. Ф., Котов В. Н., Сорокин В. А., Францкевич В. П., Яновский Л. С. Энергоемкие горючие для авиационных и ракетных двигателей / Под ред. Л. С. Яновского. — М.: Физматлит, 2009. 391 с.
4. Yetter R. A., Rabitz H., Dryer F. L. Kinetics of high-temperature B/O/H/C chemistry // *Combust. Flame*, 1991. Vol. 83. P. 43–62.
5. Brown R. C., Kolb C. E., Yetter R. A., Dryer F. L., Rabitz H. Kinetic modeling and sensitivity analysis for B/H/O/C/F combination systems // *Combust. Flame*, 1995. Vol. 101. P. 221–238.
6. Zhou W., Yetter R. A., Dryer F. L., Rabitz H., Brown R. C., Kolb C. E. Multi-phase model for ignition and combustion of boron particles // *Combust. Flame*, 1999. Vol. 117. P. 227–243.
7. Pasternak L. Gas-phase modeling of homogeneous Boron/Oxygen/Hydrogen/Carbon combustion // *Combust. Flame*, 1992. Vol. 90. P. 259–268.
8. Shaub W. M., Lin M. S. Predictive modeling of diborane oxidation // 10th Materials Research Symposium on Characterization of High Temperature Vapors and Gases NBS Proceedings. — Gaithersburg, MD, USA: National Bureau of Standard, 1979. Special publication 561. P. 1249–1261.
9. Pelevkin A. V., Sharipov A. S., Starik A. M. Theoretical analysis of elementary chemical process in $BO-O_2$ system // *Nonequilibrium processes in physics and chemistry* / Eds. A. M. Starik, S. M. Frolov. — M.: TORUS PRESS, 2016. Vol. 1. P. 63–71.
10. Bezgin L. V., Kopchenov V. I., Kuleshov P. S., Titova N. S., Starik A. M. Numerical study of combustion initiation in a supersonic flow of H_2 –air mixture by resonance laser radiation // *J. Phys. D Appl. Phys.*, 2012. Vol. 45. No. 8. P. 085401.
11. Burcat A., Ruscic B. Third millenium ideal gas and condensed phase thermochemical database for combustion with update from active thermochemical tables. Argonne National Laboratory, 2005. Technical Report.
12. 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.
13. Skinner G. B., Snyder A. D. Mechanism and chemical inhibition of the diborane–oxygen reaction // *Heterogeneous combustion* / Eds. H. G. Wolfhard, I. Glassman, L. Green, Jr. — New York, NY, USA: Academic Press, 1964. 345 p.
14. Greatrex R., Greenwood N. N., Lucas S. M. Identity of the rate-determining step in the gas-phase thermolysis of diborane: A reinvestigation of the deuterium kinetic isotope effect // *J. Am. Chem. Soc.*, 1989. Vol. 111. P. 8721–8722.
15. Sato K., Kanda N., Ogata T., Kumashiro Y. Structures of the main precursors and initial decomposition products of diborane chemical vapor deposition: An experimental and *ab initio* molecular orbital study // *Chem. Phys. Lett.*, 2000. Vol. 325. P. 453–456.

Поступила в редакцию 25.12.18

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 16-29-01098-офи_м и 18-08-00476-а).

¹ ФГУП «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», saveliev@ciam.ru

² ФГУП «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», savelieva07@mail.ru

³ ФГУП «Центральный институт авиационного моторостроения им. П. И. Баранова», titova@ciam.ru