

СОКРАЩЕНИЕ ДЛИНЫ ПРЕДЕТОНАЦИОННОГО  
УЧАСТКА В ХИМИЧЕСКИ ПОДГОТОВЛЕННОЙ  
ГАЗОВОЙ СМЕСИ: ЭФФЕКТ ЩЁЛКИНА–СОКОЛИКА**В. Я. Басевич, Б. В. Лидский, С. М. Фролов**ИХФ РАН  
г. Москва, Россия

В настоящее время активно изучается возможность использования управляемого детонационного взрыва газовых и капельных взрывчатых смесей в силовых установках летательных аппаратов и в мощных импульсных горелочных устройствах [1]. Одна из ключевых проблем на пути практического использования детонационного взрыва — обеспечение надежного перехода горения в детонацию (ПГД) при низкой энергии зажигания смеси в относительно коротких трубах. В литературе известен ряд «физических» и «химических» способов, позволяющих в той или иной мере решить эту проблему. Цель данной работы — дать количественное теоретическое объяснение эффекту Щёлкина–Соколика [2], согласно которому длина преддетонационного участка (длина ПГД) зависит от продолжительности тепловой обработки взрывчатой смеси до ее зажигания внешним источником. В [2] экспериментально показано, что предварительная тепловая подготовка пентано-кислородной смеси перед искровым зажиганием приводила к почти двукратному сокращению длины ПГД. Обнаруженный эффект резкого сокращения длины ПГД авторы [2] объяснили тем, что холодно-пламенная стадия окислительного процесса значительно изменяет реакционно-кинетические свойства смеси («химическая подготовка» [2]).

Чтобы оценить влияние химии холодно-пламенного окисления и возникающих промежуточных продуктов на длину ПГД в пентано-кислородной смеси, провели серию кинетических и газодинамических расчетов. В расчетах использовали детальный кинетический механизм, предложенный в [3], а также сокращенный механизм. Де-

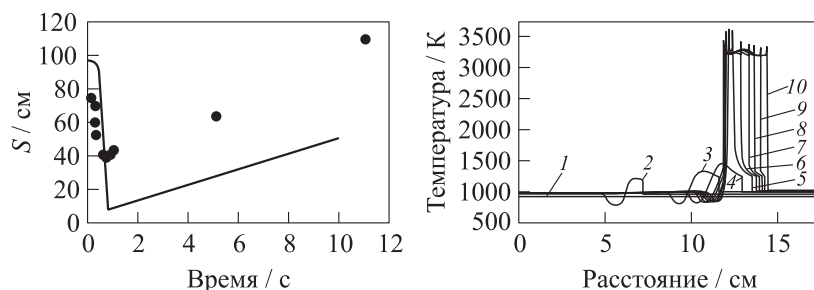
тальный механизм [3] описывает газофазную кинетику окисления и горения пентана и содержит 387 обратимых элементарных реакций между 77 компонентами. Поскольку эксперименты [2] проводились при относительно низком начальном давлении в трубке небольшого диаметра, при проведении кинетических расчетов учитывали теплоотдачу в стенку и стеночные реакции гибели активных продуктов. Рассматривали лишь две эффективные (диффузионные) стеночные реакции распада алкилгидроперекиси  $C_5H_{11}O_2H$  и перекиси водорода  $H_2O_2$  с образованием стабильных продуктов.

Сначала при заданных начальных значениях температуры (600–900 К) и давления (0,42 атм), соответствующих опытам [2], с помощью кинетической программы рассчитали изменение состава и температуры смеси во времени. Это позволило получить информацию о влиянии длительности предварительной тепловой обработки (задержки зажигания  $t_i$ ) на температуру и состав смеси. Далее использовали известный факт, что для прямого инициирования детонации в стехиометрических топливно-кислородных смесях необходимы ударные волны, обеспечивающие температуру ударно сжатой смеси на уровне 1100–1200 К. Для определенности рассматривали ударную волну (УВ) с числом Маха  $M \approx 2,3$ . Используя кинетическую программу, рассчитали задержки самовоспламенения смеси  $\tau_{ign}$  за такой УВ и построили зависимость  $\tau_{ign}$  от длительности предварительной тепловой обработки смеси:  $\tau_{ign}(t_i)$ . В соответствии с определением длины ПГД  $S$ , использованным в [2], место возникновения детонации соответствует месту самовоспламенения смеси за УВ. Для получения зависимости  $S(t_i)$  по зависимости  $\tau_{ign}(t_i)$  использовали формулу

$$S = \frac{D_{SW}\rho_0\tau_{ign}}{\rho_{SW}},$$

где  $D_{SW}$  — скорость УВ, а  $\rho_0$  и  $\rho_{SW}$  — плотность смеси перед и за фронтом УВ.

На рис. 1 приведено сравнение расчетной (кривая) и измеренной (точки [2]) зависимостей  $S(t_i)$ . Видно, что результаты расчета качественно хорошо согласуются с опытными данными [2] несмотря на то, что расчетная зависимость  $S(t_i)$  не учитывает расстояние, на котором УВ формируется и достигает скорости  $D_{SW}$ . Напомним, что в экспериментах [2] детонацию инициировали не ударной



**Рис. 1** Сравнение расчетной (кривая) и измеренной (точки [2]) зависимостей длины ПГД от времени предварительной тепловой обработки пентано-кислородной смеси

**Рис. 2** Профили температуры за бегущей УВ в разные моменты времени 1–10, рассчитанные по одномерной газодинамической программе. Детонация возникает в момент времени 5

волной, а получали в результате ПГД. Особенно важно, что минимальное значение  $S$  и в расчетах, и в опытах [2] достигается при близких значениях  $t_i$ : в обоих случаях это значение соответствует возникновению холодного пламени.

На рис. 2 показаны профили температуры за бегущей УВ в разные моменты времени 1–10, рассчитанные по одномерной газодинамической программе для случая, когда длина ПГД  $S$  близка к минимальной. За время  $t_i$  смесь разогревается холодным пламенем от 608 до  $\sim 900$  К. Через относительно короткий промежуток времени  $\Delta t \approx 120$  мкс после начала распространения УВ (кривая 5 на рис. 2), за фронтом УВ происходит самовоспламенение. В результате самовоспламенения в ударно сжатом газе быстро формируются две взрывных волны: волна пересжатой детонации, догоняющая первичную УВ, и волна ретонации, распространяющаяся в обратном направлении. При  $\Delta t > 130$  мкс по трубке по направлению к правому концу распространяется самоподдерживающаяся детонационная волна, причем расчетная средняя скорость детонации ( $\approx 1990$  м/с) очень близка к измеренному значению 1970 м/с [2]. Все особенности зарождения детонации в проведенных расчетах согласуются с наблюдениями [2].

Таким образом, в работе дано теоретическое объяснение эффекту Щёлкина–Соколика, согласно которому длина ПГД зависит от продолжительности тепловой обработки взрывчатой смеси до ее зажигания внешним источником. Проведены газодинамические и кинетические расчеты прямого инициирования детонации в пентано-кислородной смеси с использованием детального и сокращенного кинетических механизмов окисления пентана. Показано, что тепловая обработка смеси приводит к сокращению длины ПГД, причем минимальная длина преддетонационного участка достигается, когда в момент прихода УВ в смеси возникает холодное пламя. Проведено сравнение расчетной и измеренной зависимостей длины ПГД от времени предварительной тепловой обработки смеси и получено хорошее качественное согласие результатов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 08-08-00068).

## Литература

1. Импульсные детонационные двигатели / Под ред. С. М. Фролова. — М.: ТОРУС ПРЕСС, 2006.
2. Щёлкин К. И., Соколик А. С. Детонация в газовых смесях. IV. Влияние «химической подготовки» на возникновение детонации в газовых смесях // Ж. физической химии, 1937. Т. 10. С. 484.
3. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от  $C_1$ – $C_4$  к  $C_5H_{12}$  // Химическая физика, 2009. Т. 28. № 6.