

# ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА ДЛЯ ОПИСАНИЯ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПЛАМЕНИ ГЕКСОГЕНА. II. ПОСТРОЕНИЕ УКРОЧЕННОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ

Н. Е. Ермолин, В. Е. Зарко\*

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск

\*Институт химической кинетики и горения СО РАН, 630090 Новосибирск

Построен укороченный кинетический механизм с учетом различных граничных условий и значительного разброса данных по константам скоростей элементарных стадий. Выделены кинетические схемы, с различной степенью точности описывающие химическую структуру пламен. Максимально усеченный механизм состоит из 83 стадий и 29 компонентов. Тепловые потоки, а также профили температуры и основных (по массе) компонентов, рассчитанные по полному и укороченному (редуцированному) механизмам, хорошо согласуются между собой.

## ПОСТРОЕНИЕ УКРОЧЕННОГО КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА

С учетом значительного разброса данных по константам скоростей элементарных стадий отбор ведущих стадий и компонентов из табл. 2 работы [1] проведен как с использованием констант из механизмов [2, 3], так и при вариации констант скоростей.

В указанном в [1] диапазоне давлений и множестве составов и констант скоростей элементарных стадий отбор ведущих стадий и компонентов проведен с использованием методики [4]. Согласно [4] роль  $i$ -го компонента и  $j$ -й стадии характеризуется интегральными параметрами  $\varepsilon_i$  и  $\delta_{ij}$ , меняющимися в пределах от 0 до 1. Здесь  $\varepsilon_i$  — величина относительного производства  $i$ -го компонента,  $\delta_{ij}$  — относительный вклад  $j$ -й стадии в производство  $i$ -го компонента. Ведущими считаются компоненты с  $\varepsilon_i > \varepsilon$  и стадии с  $\delta_{ij} > \delta$  хотя бы для одного из анализируемых компонентов. В зависимости от значений  $\varepsilon$  и  $\delta$  получаются укороченные (редуцированные) механизмы, с различной степенью точности аппроксимирующие полный механизм.

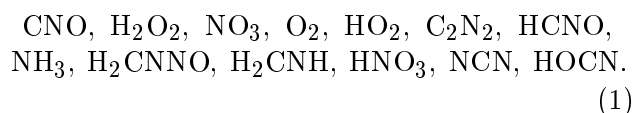
Результаты отбора представлены ниже для второй ветви распада RDXR (по нашему мнению, наиболее предпочтительной) — по каналу В [1].

Работа выполнена при частичной поддержке программы «Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки» (проект К-1080).

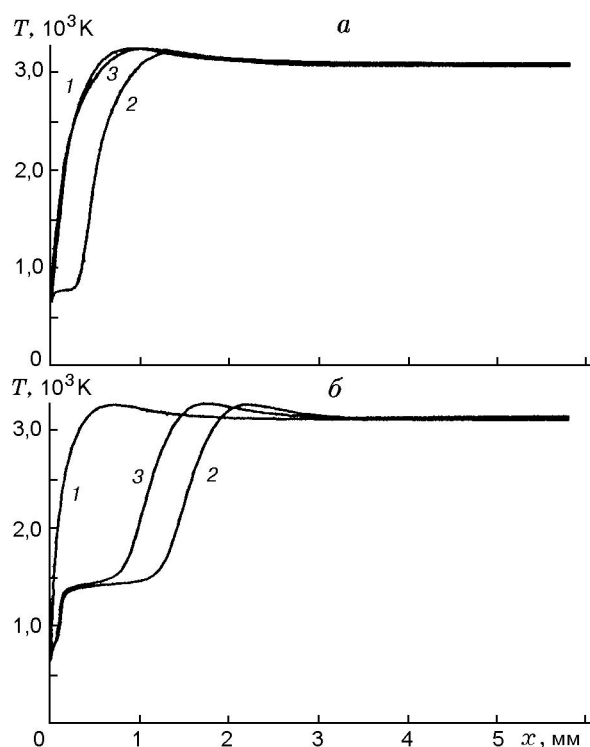
Распределение компонентов по производству в зависимости от значений констант скоростей можно записать в следующем виде:

$0 \leq \varepsilon \leq 0,01$	—	CNO, H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , NO <sub>3</sub> ,
$0,01 < \varepsilon \leq 0,03$	—	O <sub>2</sub> , HO <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> , HCNO, NH <sub>3</sub> , H <sub>2</sub> CNNO, H <sub>2</sub> CNH, HNO <sub>3</sub> , NCN,
$0,03 < \varepsilon \leq 0,05$	—	N <sub>2</sub> H, HOCN
$0,05 < \varepsilon \leq 0,1$	—	N, NCO, CN, CO <sub>2</sub> .

Производство остальных компонентов превышает 0,1. Таким образом, частичное усечение механизма можно провести путем исключения из полного механизма компонентов с малым производством:



Кроме того, для рассматриваемой ветви, как обсуждалось в [1], можно исключить частицу RDXRO, исключив стадию 136 и заменив в стадии 170 RDXRO на RDXR. При исключении других компонентов необходима корректировка констант скоростей. Так, исключение N<sub>2</sub>H в случае граничных условий (1) [1] приводит к сдвигу температурного профиля в светящейся зоне на  $\approx 0,3$  мм от поверхности горения. А в отдельных расчетах исключение какого-либо из компонентов N<sub>2</sub>H, N, NCO, CN, CO<sub>2</sub> или компонентов с  $\varepsilon > 0,1$  вызывает сильное изменение структуры пламени. В случае первой ветви распада RDXR (канал А [1]) такое

Рис. 1. Влияние  $O_2$ :

$p = 1$  атм, постоянная площадь поперечного сечения струйки тока; а — канал А:  $m$ ,  $кг/(м^2 \cdot с)$ : 1 — 1,9; 2, 3 — 2,1 (в варианте 3 исключен  $O_2$ ); б — канал В:  $m$ ,  $кг/(м^2 \cdot с)$ : 1 — 1,4; 2, 3 — 1,6 (в варианте 3 исключен  $O_2$ )

редуцирование химического механизма приводит к изменению более чем на 30 % ширины зоны распада пара или значительному изменению мольных долей основных по массе компонентов. В случае разложения RDXR по каналу А производства компонентов из (1) по-прежнему малы. Однако величины производств несколько меняются. Так, производство  $O_2$  и  $N_2H$ ,  $HO_2CN$  возрастает: значения  $\epsilon$  для этих компонентов находятся в пределах  $0,03 < \epsilon \leq 0,05$  и  $0,05 < \epsilon \leq 0,1$  соответственно.

Заметим, что в [5] наряду с другими частицами предлагается исключить  $H_2O_2$ ,  $NCN$ ,  $CNO$ ,  $HCNO$ ,  $NO_3$ ,  $HNO_3$ ,  $H_2CNH$ ,  $H_2CNO$ , а также RDXR, RDXRO как промежуточные. В механизме [3] отсутствуют  $H_2O_2$ ,  $NCN$ ,  $NO_3$ ,  $HNO_3$ . Как отмечено в [1], частица  $H_2CNO$  играет важную роль в механизме горения. Ее исключение при граничных условиях (1) [1] приводит к сдвигу светящейся зоны приблизительно на 0,8 мм к начальному расчетному сечению.

Как показывают расчеты, влияние компонентов с малым производством может быть различным. Например, для граничных условий из табл. 3 [1] исключение  $O_2$  вызывает незначительное сужение реакционных зон и увеличение в начальном сечении тепловых потоков на  $2,8 \div 21,7$  % для состава № 1 либо на  $0,1 \div 4,6$  % для состава № 2. Однако в случае массовых расходов, близких к критическим, исключение  $O_2$  приводит к сильному изменению структуры реакционных зон (рис. 1).

В табл. 1 приведены группы реакций, дающих соответственно вклад  $0,1 \leq \delta \leq 1$ ,  $0,2 \leq \delta \leq 1$  и  $0,3 \leq \delta \leq 1$  в производство хотя бы одного из компонентов. Вклад брутто-стадии 263 в производство превышает 0,3. Однако, в соответствии с замечаниями [1] о роли стадии 263, в табл. 1 и ниже она исключена из рассмотрения. Редуцированные механизмы могут быть получены путем комбинаций групп компонентов и групп реакций с заданными значениями  $\epsilon$  и  $\delta$ . Минимальный из рассмотренных ниже редуцированных механизмов получен исключением 14 компонентов и стадий с  $\delta < 0,2$ . Он содержит 29 компонентов и 83 стадии и приведен в табл. 1. Сопоставление свойств редуцированных механизмов с полным проводилось с учетом как температурного и концентрационных профилей основных (по массе) компонентов, так и тепловых потоков в начальном расчетном сечении.

В табл. 2 приведены механизмы, соответствующие принятым значениям  $\delta$  и максимальному числу исключенных компонентов. Дополнительно в таблицу включены механизмы № 5, 10, отличающиеся от механизмов № 4, 9 лишь наличием стадий 89, 254, влияющих на сдвиг светящейся зоны и ширину зоны распада пара. Результаты сопоставления свойств механизмов при граничных условиях (1) [1] приведены в табл. 2 и на рис. 2. Данные, полученные на основе расчетов по полному и редуцированному механизмам из табл. 2, за исключением механизмов № 4 и 9, хорошо согласуются между собой. В частности, различие тепловых потоков в начальном сечении не превышает 1 %. Для механизмов № 4, 9 различие тепловых потоков в начальном сечении также мало ( $\approx 6$  %), однако сдвиг светящейся зоны значителен.

При проведении расчетов с использованием механизмов из табл. 2 и с граничными условиями из табл. 3 [1] расхождение данных, полученных на основе полного и редуцированных

Таблица 1

## Распределение стадий по вкладам в производство компонентов

$0,1 \leq \delta \leq 1,0$ (149 стадий)	
1, 2, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 15, 18, 19, 20, 21, 23, 24, 25, 26, 27, 29, 30, 31, 32, 33, 35, 37, 38, 39, 40, 44, 45, 47, 50, 51, 52, 53, 55, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 65, 66, 67, 68, 70, 72, 73, 76, 77, 78, 79, 82, 83, 89, 90, 94, 98, 101, 102, 103, 107, 108, 109, 112, 115, 118, 119, 120, 121, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 138, 139, 142, 143, 144, 145, 146, 149, 151, 152, 153, 154, 156, 157, 158, 161, 162, 163, 164, 165, 167, 169, 170, 172, 175, 177, 179, 180, 184, 185, 186, 190, 191, 194, 197, 198, 207, 208, 211, 212, 213, 216, 217, 218, 220, 222, 223, 224, 228, 231, 233, 236, 239, 240, 241, 243, 244, 245, 248, 253, 254, 255, 256, 258, 260	
$0,2 \leq \delta \leq 1,0$ (127 стадий)	
2, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 15, 19, 20, 21, 23, 24, 27, 29, 30, 31, 32, 33, 37, 38, 39, 40, 44, 47, 50, 51, 52, 53, 55, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 65, 66, 67, 68, 70, 72, 76, 77, 78, 79, 82, 83, 89, 90, 98, 101, 102, 103, 107, 108, 109, 118, 119, 120, 121, 125, 126, 127, 128, 129, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 138, 139, 142, 143, 144, 145, 146, 149, 151, 152, 153, 154, 156, 157, 158, 162, 163, 164, 165, 169, 170, 172, 177, 179, 180, 186, 194, 198, 207, 211, 212, 213, 218, 220, 222, 223, 224, 228, 231, 233, 236, 239, 240, 241, 243, 244, 245, 248, 253, 254, 255, 256, 258, 260	
$0,3 \leq \delta \leq 1,0$ (104 стадии)	
2, 6, 7, 8, 9, 11, 13, 15, 19, 20, 21, 23, 24, 27, 29, 30, 31, 32, 33, 37, 38, 39, 40, 47, 50, 51, 52, 55, 59, 60, 61, 62, 65, 66, 67, 68, 70, 72, 76, 77, 79, 90, 98, 101, 102, 103, 107, 109, 118, 119, 126, 127, 128, 129, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 138, 139, 142, 143, 144, 145, 146, 151, 152, 153, 154, 157, 158, 162, 163, 164, 165, 169, 170, 172, 177, 179, 198, 211, 212, 213, 218, 222, 223, 224, 228, 231, 233, 236, 239, 240, 241, 243, 244, 253, 255, 256, 258, 260	
Минимальный механизм (29 компонентов, 83 стадии)	
Исключены стадии с $\delta \leq 0,2$ и 14 компонентов: CNO, H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , NO <sub>3</sub> , O <sub>2</sub> , HO <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> , HCNO, NH <sub>3</sub> , H <sub>2</sub> CNNO, H <sub>2</sub> CNH, HNO <sub>3</sub> , NCN, HOCN, RDXRO. В стадии 170 RDXRO заменен на RDXR	
2, 6, 8, 13, 15, 19, 20, 24, 27, 30, 32, 33, 38, 40, 44, 47, 50, 51, 52, 53, 55, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 65, 66, 67, 68, 70, 72, 77, 78, 79, 82, 83, 89, 90, 101, 102, 103, 107, 108, 109, 119, 120, 121, 125, 126, 131, 132, 133, 134, 135, 138, 142, 143, 144, 145, 146, 149, 154, 156, 169, 170, 172, 179, 180, 186, 194, 198, 207, 212, 228, 233, 236, 253, 254, 255, 256, 260	

механизмов № 5, 10, оказалось значительным при низких давлениях ( $p \leq 5$  атм). Так, для состава № 2 тепловые потоки в начальном сечении, полученные с использованием механизмов № 5, 10, превышают в  $\approx 1,8$  раз тепловые потоки, полученные с использованием полного механизма. В случае механизма № 4 тепловые потоки в начальном сечении хорошо согласуются с тепловыми потоками, полученными на основе полного механизма (на  $8 \div 21$  % больше, чем для полного механизма для состава № 1, и на  $1 \div 12,6$  % меньше, чем для полного механизма

для состава № 2). В случае механизма № 9 для состава № 2 происходит значительное замедление реакции горения: по сравнению с полным механизмом тепловой поток в начальном сечении уменьшается в 1,98 раз при  $p = 5$  атм и не более чем в 1,25 раз для других значений давления. Следует заметить, что основным отличием результатов расчетов по полному и редуцированному механизмам № 4, 5, 9, 10 является изменение ширины реакционных зон. Концентрационные профили основных компонентов качественно хорошо согласуются. Из других меха-

Таблица 2

Результаты расчетов на основе полного и редуцированных механизмов для граничных условий (1) [1]

Механизм	$L$ , мм	$D$ , мм	$T_{\max}$ , К	$T_{\text{к}}$ , К	Примечания
1	0,485	0	3193	3077	Полный механизм
2	0,485	0	3194	3078	Исключены стадии с $\delta < 0,1$
3	0,485	0,083	3208	3077	Исключены стадии с $\delta < 0,2$
4	0,584	0,54	3255	3078	Исключены стадии с $\delta < 0,3$
5	0,504	-0,067	3230	3078	Механизм № 4, учтены стадии 89, 254
6	0,467	0,083	3188	3099	Исключены 14 компонентов*
7	0,468	0,166	3208	3100	Исключены стадии с $\delta < 0,1$ и 14 компонентов*
8	0,468	0,166	3201	3100	Исключены стадии с $\delta < 0,2$ и 14 компонентов*
9	0,584	0,93	3234	3097	Исключены стадии с $\delta < 0,3$ и 14 компонентов*
10	0,504	0,1	3211	3098	Механизм № 9, учтены стадии 89, 254

Примечание.  $L$  — ширина зоны разложения пара RDX,  $D$  — сдвиг (вправо +, влево -) температурного профиля в светящейся зоне относительно температурного профиля варианта № 1,  $T_{\max}$  — максимальное значение температуры,  $T_{\text{к}}$  — температура в конечном расчетном сечении  $x = 6$  мм, \* — компоненты из табл. 1.

Таблица 3

Результаты расчетов на основе полного и минимального механизмов для граничных условий из табл. 3 [1]

$p$ , атм	$g_{\text{п}}$ , Дж/(м <sup>2</sup> ·с)	$g$ , Дж/(м <sup>2</sup> ·с)	$\Delta$ , %	$T_{\text{к,п}}$ , К	$T_{\text{к}}$ , К
Состав № 1					
90	$3,58 \cdot 10^8$	$4,02 \cdot 10^8$	10,9	3361	3357
20	$7,60 \cdot 10^7$	$8,89 \cdot 10^7$	14,5	3176	3160
5	$1,86 \cdot 10^7$	$1,97 \cdot 10^7$	5,58	3123	3107
1	$3,08 \cdot 10^6$	$3,74 \cdot 10^6$	17,6	3097	3094
0,5	$1,44 \cdot 10^6$	$1,89 \cdot 10^6$	23,8	3029	3004
Состав № 2					
90	$4,36 \cdot 10^7$	$4,02 \cdot 10^7$	7,8	3285	3299
20	$8,98 \cdot 10^6$	$8,24 \cdot 10^6$	8,24	3119	3131
5	$1,32 \cdot 10^6$	$1,24 \cdot 10^6$	6,06	2996	3020
1	$3,95 \cdot 10^5$	$3,53 \cdot 10^5$	10,6	2882	2909
0,5	$2,90 \cdot 10^5$	$2,76 \cdot 10^5$	4,83	2842	2876

Примечание.  $g = \lambda(\partial T/\partial x)$  — тепловой поток в начальном расчетном сечении;  $\Delta = |g_{\text{п}} - g|/\max(g_{\text{п}}, g)$ , индекс «п» относится к полному механизму;  $T_{\text{к}}$  — температура в конечном расчетном сечении, зависящем от давления.

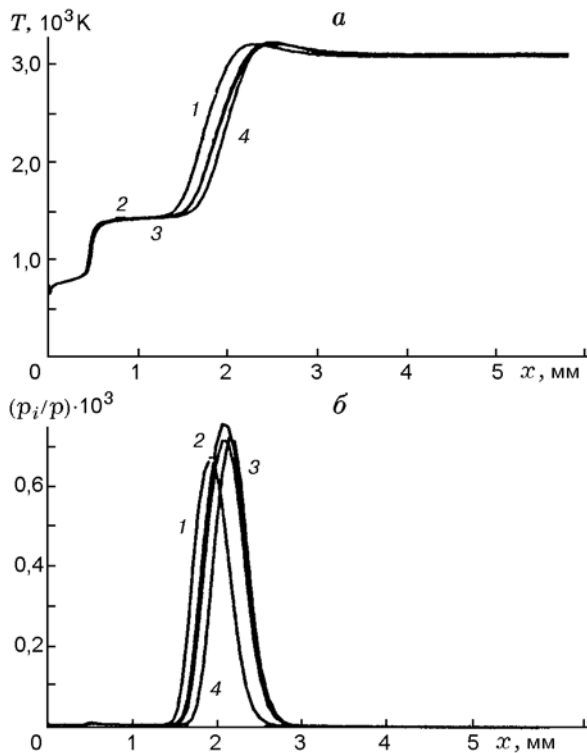


Рис. 2. Распределение температуры (а) и мольных долей CN (б) в пламени RDX:

$p = 1$  атм,  $m = 3,847$  кг/(м<sup>2</sup>·с); 1 — механизм из табл. 2 [1], 2 — № 7 из табл. 2, 3 — № 8 из табл. 2, 4 — из работы [2]

низмов, представленных в табл. 2, минимальным является механизм № 8, детализированный в табл. 1.

Результаты расчетов по полному и минимальному механизмам, полученные для граничных условий из табл. 3 [1], приведены в табл. 3 и на рис. 3–5. На рис. 6 приведены экспериментальные данные, полученные авторами работы [6] при  $p = 1$  атм в условиях самоподдерживающегося горения гексогена. Данные, приведенные на рис. 5 и 6, качественно хорошо согласуются между собой. Выборочные расчеты для других механизмов из табл. 2 (за исключением механизмов № 4, 5, 9, 10) с граничными условиями из табл. 3 [1] также демонстрируют хорошее согласие с полным механизмом. Так, максимальные различия тепловых потоков в начальном сечении, полученные на основе механизмов № 7 и полного, не превышают 26,3 % для состава № 1 и 17,2 % для состава № 2.

В [7] масс-спектрометрическим методом исследовалась химическая структура светя-

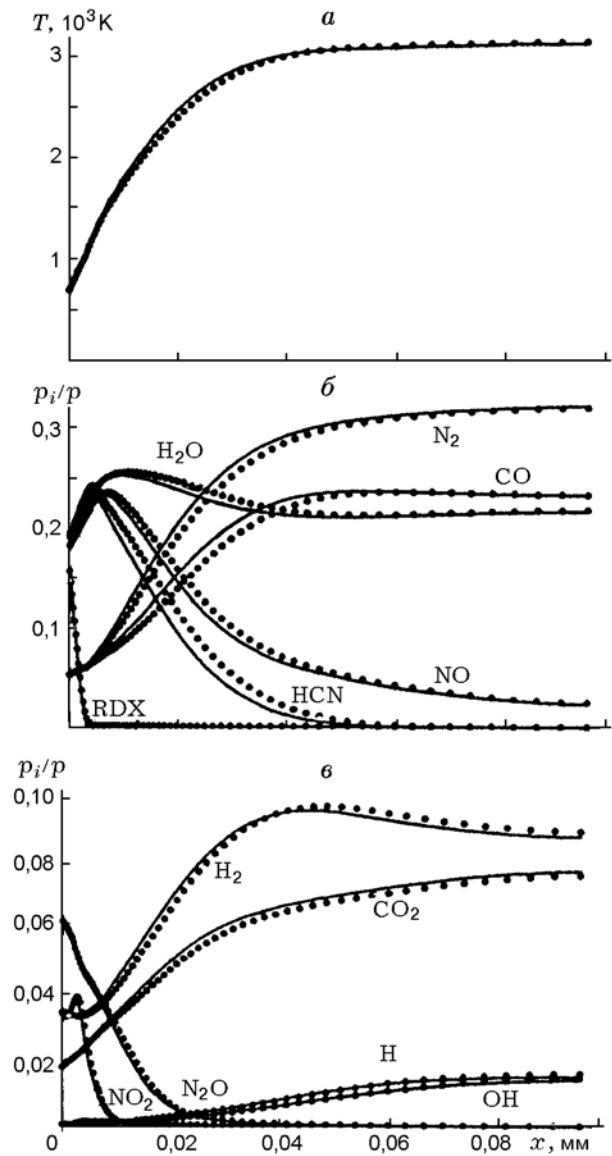


Рис. 3. Распределение температуры (а) и мольных долей компонентов (б, в) в пламени RDX:

состав № 2,  $p = 20$  атм; сплошные кривые — механизм из табл. 2 [1], точки — минимальный механизм

щейся зоны пламени RDX. При  $p = 0,5$  атм получены экспериментальные данные для части компонентов. Уточненные экспериментальные данные обсуждены в [8], где они были сопоставлены с результатами расчетов. Расчетные данные по химической структуре светящейся зоны пламени, полученные с использованием полного и минимального механизмов, представлены на рис. 7, 8. В наших расчетах, вследствие отсутствия данных по температурному профилю, температура в начальном сечении была опреде-

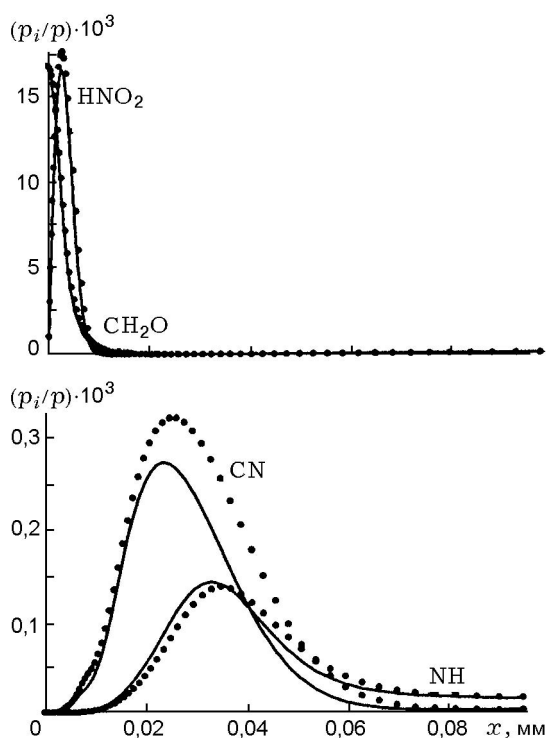
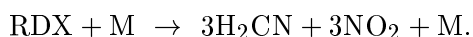


Рис. 4. Распределение мольных долей компонентов в пламени RDX: состав № 2,  $p = 20$  атм; сплошные кривые — механизм из табл. 2 [1], точки — минимальный механизм

лена из условия достаточно полного согласия расчетных и экспериментальных концентрационных профилей. Как следует из рис. 7, 8, результаты расчетов на основе указанных механизмов также хорошо согласуются между собой в случае задания граничных условий из [8].

В работе [5] применительно к процессам самоподдерживающегося горения RDX механизм [2, 3, 9], содержащий 45 компонентов и 232 стадии, был редуцирован до 18 компонентов и 39 стадий. При этом процесс разложения пара RDX моделировался брутто-стадией



С помощью введения брутто-стадий и подгонки кинетических параметров получен «глобальный» механизм, содержащий 9 компонентов и 6 стадий. В обоих случаях корректировался также и механизм разложения конденсированной фазы. В диапазоне давления  $p = 1 \div 100$  атм расчетные данные (механизмы S 18-39 и G 9-6 в обозначениях [5]) удовлетворительно согласуются с экспериментальными значениями ско-

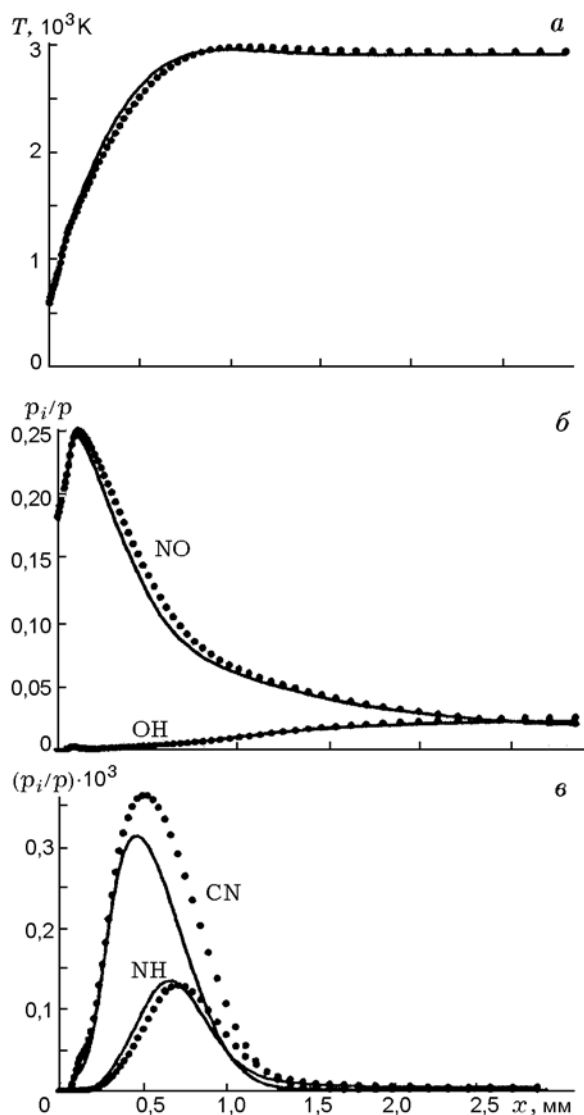


Рис. 5. Распределение температуры (а) и мольных долей компонентов (б, в) в пламени RDX: состав № 2,  $p = 1$  атм, сплошные кривые — механизм из табл. 2 [1], точки — минимальный механизм

рости горения, температуры поверхности горения, толщины расплавленного слоя и адиабатической температуры пламени RDX [5]. Однако эти механизмы мало пригодны для описания химической структуры пламени RDX: при их использовании утрачиваются важные свойства, присущие полному механизму. В частности, концентрационные профили, рассчитанные в [5] при  $p = 20$  атм на основе полного и редуцированного (S 18-39) механизмов, удовлетворительно согласуются лишь для  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,

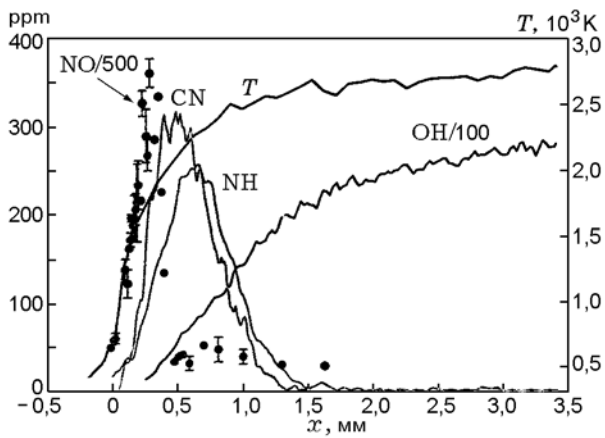


Рис. 6. Распределение температуры и компонентов в пламени RDX при самовоспламенении:  $p = 1$  атм, данные экспериментов [6]

$N_2$ , NO, CO. На поверхности горения мольная доля пара RDX  $\approx 0,15$  для полного механизма и  $\approx 0,25$  для механизма S 18-39. При этом зона распада пара в расчетах по полному механизму примерно в три раза уже, чем для механизма S 18-39, а максимальные значения мольных долей  $N_2O$ ,  $NO_2$ ,  $CH_2O$ , рассчитанные по этим механизмам, различаются в несколько раз [5].

Результаты наших расчетов для граничных условий (1) [1] с использованием механизма S 18-39 приведены на рис. 9. В этом случае характер процесса резко меняется: у поверхности горения образуется индукционная зона, результаты расчета плохо согласуются с данными, полученными на основе механизма из табл. 2 [1]. При моделировании самоподдерживающегося горения при  $p = 0,5 \div 90$  атм зона распада пара RDX, рассчитанная на основе механизма из табл. 2 [1], для состава № 2 в 2  $\div$  3,5 раза, а для состава № 1 в 2  $\div$  5 раз короче зоны, рассчитанной на основе механизма S 18-39. При этом тепловые потоки в начальном сечении, рассчитанные с использованием механизма из табл. 2 [1], для состава № 2 в 1,1  $\div$  1,8 раз меньше, а для состава № 1 в 2  $\div$  3 раза больше тепловых потоков, рассчитанных с использованием механизма S 18-39. В случае, когда  $p = 1$  атм,  $m = 0,83$  кг/( $m^2 \cdot c$ ) и используется состав № 2, расчет по механизму из табл. 2 [1] показывает, что газовая смесь не воспламеняется на расстоянии  $\leq 3$  мм от начального сечения, в то время как расчет по механизму S 18-39 дает интенсивное протекание реакции горения. В частности, ширина зоны распада пара RDX  $\approx 0,206$  мм.

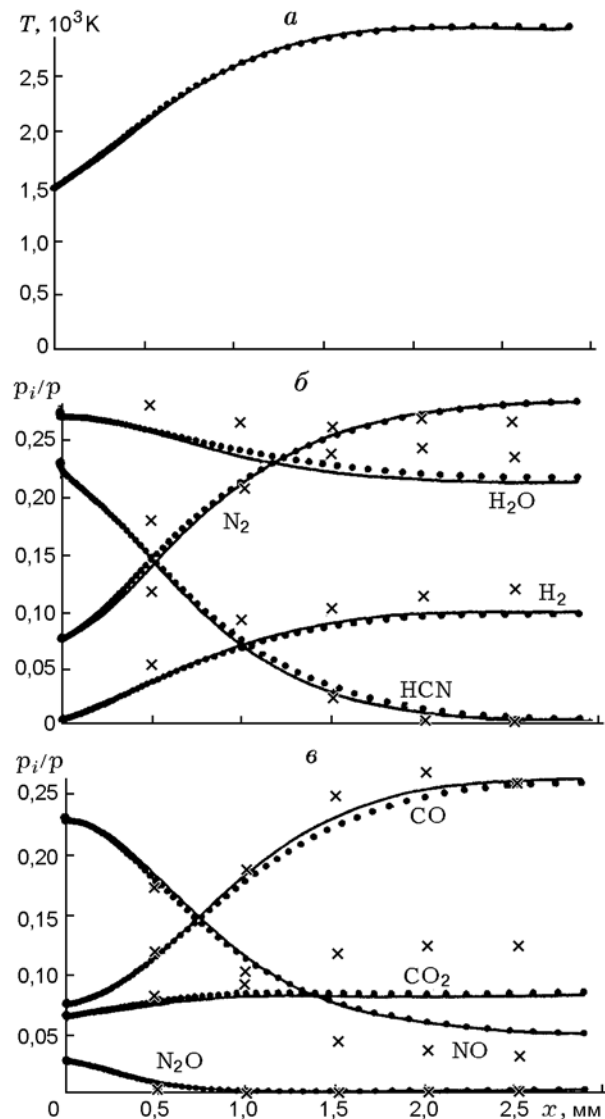


Рис. 7. Распределение температуры (а) и мольных долей компонентов (б, в) в светящейся зоне пламени RDX:

$p = 0,5$  атм,  $m = 0,34$  кг/( $m^2 \cdot c$ ); сплошные кривые — механизм из табл. 2 [1], точки — минимальный механизм, крестики — данные экспериментов [8]

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе подведены некоторые итоги исследования общих свойств химического механизма реакций в пламени гексогена. На основе результатов численных расчетов проведено редуцирование детального механизма химических реакций. Выделены укороченные механизмы, близкие по своим свойствам к полному.

Минимальный редуцированный кинетический механизм состоит из 29 компонентов и 83

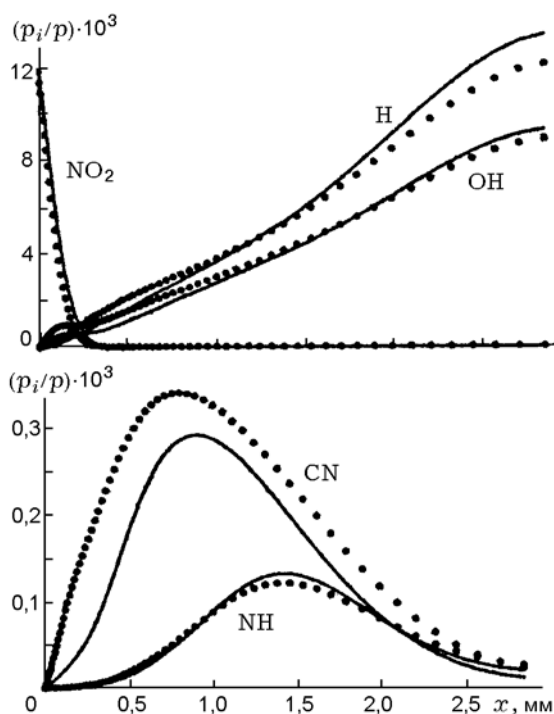


Рис. 8. Распределение мольных долей компонентов в светящейся зоне пламени RDX:

$p = 0,5$  атм,  $m = 0,34$  кг/(м<sup>2</sup>·с); сплошные кривые — механизм из табл. 2 [1], точки — минимальный механизм

обратимых стадий. Без какой-либо корректировки констант скоростей реакций механизм воспроизводит основные свойства структуры пламени, рассчитанной на основе механизма, состоящего из 43 компонентов и 263 стадий. Слабая чувствительность расчетной скорости горения к виду кинетического механизма позволяет проводить дальнейшую редукцию полного механизма путем коррекции констант скоростей и введения брутто-стадий. Однако границы применимости таких механизмов резко сужаются: теряется предсказательная сила, затрудняется детализация на их основе химии процесса, необходимая для разработки новых составов и прогнозирования их баллистических свойств.

Работа по исследованию химического механизма горения гексогена должна быть продолжена, в первую очередь в части получения экспериментальной информации о кинетике элементарных стадий разложения пара исходного вещества и крупных осколков материнской молекулы. Вместе с тем необходимо детально исследовать физико-химические про-

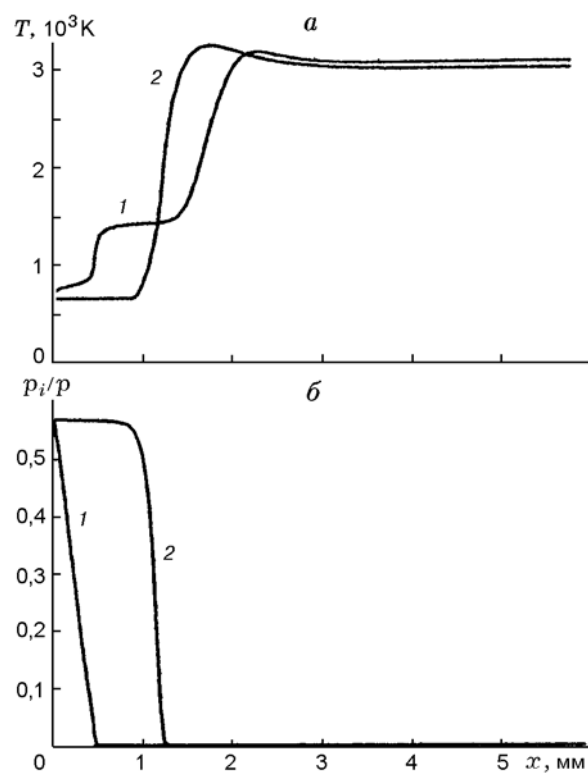


Рис. 9. Профили температуры (а) и концентрации пара RDX (б):

$p = 1$  атм,  $m = 3,847$  кг/(м<sup>2</sup>·с); 1 — механизм из табл. 2 [1]; 2 — механизм S 18-39 [5]

цессы, протекающие в пределах конденсированной фазы, для определения вкладов процессов испарения и разложения и для получения данных по температуре поверхности и составу газовой фазы, генерируемой поверхностью горения.

Авторы признательны Т. Парру и Д. Хансон-Парр за предоставленные экспериментальные данные по структуре волны горения RDX в самоподдерживающемся режиме и под воздействием излучения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ермолин Н. Е., Зарко В. Е. Исследование свойств кинетического механизма для описания химической структуры пламени гексогена. I. Роль отдельных стадий и индивидуальных компонентов // Физика горения и взрыва. 2001. Т. 37, № 2. С. 3–29.
2. Prasad K., Yetter R. A., and Smooke M. D. An eigenvalue method for computing the burning rates of RDX propellants // AIAA Paper. N 96-0880. 1996.



3. **Melius C. F.** Thermochemical modeling. II: Application to ignition and combustion of energetic materials // Chemistry and Physics of Molecular Processes in Energetic Materials / S. Bulusu (Ed.). Boston: Kluwer, 1990. P. 51–78.
4. **Ермолин Н. Е., Коробейничев О. П., Терещенко А. Г., Фомин В. М.** Расчет кинетики и установление механизма химических реакций в пламени перхлората аммония // Физика горения и взрыва. 1982. Т. 18, № 2. С. 61–70.
5. **Davidson J. E., Jeppson M. B., and Beckstead M. W.** A reduced mechanism for RDX combustion // 33rd JANNAF Combustion Meeting, Monterey, CA, Nov, 1996.
6. **Parr T. P., Hanson-Parr D. M.** Private communication. See also: Solid propellant flame structure // Decomposition, Combustion and Detonation of Energetic Materials: Symp. held Nov. 27–30, 1995, Boston, U.S.A. / T. B. Brill, T. P. Russell, W. C. Tao, et al. (Eds). Pittsburgh, 1996. P. 207–219.
7. **Коробейничев О. П., Куйбида Л. В. и др.** Изучение структуры пламен и химических реакций в пламенах масс-спектрометрическим методом // Масс-спектрометрия и химическая кинетика. М.: Наука, 1985. С. 73–93.
8. **Ермолин Н. Е., Коробейничев О. П., Куйбида Л. В., Фомин В. М.** Анализ химических процессов в пламени гексогена // Физика горения и взрыва. 1988. Т. 24, № 4. С. 21–29.
9. **Yetter R. A., Dryer F. L., Allen M. T. and Gatto J. L.** Development of gas-phase reaction mechanisms for nitramine combustion // J. Propulsion and Power. 1995. V. 11, N 4. P. 683–697.

*Поступила в редакцию 16/V 2000 г.,  
в окончательном варианте — 24/VII 2000 г.*

---