

УДК 532.529+541.126

ПРОБЛЕМЫ ЗАМЫКАНИЯ МОДЕЛЕЙ ПРИ ОПИСАНИИ ДЕТОНАЦИИ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ ГАЗОВЗВЕСЕЙ АЛЮМИНИЯ (ОБЗОР)

А. В. Фёдоров, Т. А. Хмель

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск
khmel@itam.nsc.ru

Представлен обзор работ, относящихся к физико-математическому моделированию процессов детонации газовзвесей мелкодисперсных, субмикронных и наноразмерных частиц алюминия в рамках механики сплошных и гетерогенных сред. Обсуждаются вопросы описания тепловой динамики, транспортных свойств и механизмов воспламенения, а также особенности режимов горения микро- и наноразмерных частиц. Приведены замыкающие соотношения для полуэмпирической модели детонации наноразмерных взвесей частиц алюминия в кислороде.

Ключевые слова: детонация, газовзвесь, алюминий, микрочастица, наночастица, математическое моделирование.

DOI 10.15372/FGV20190101

ВВЕДЕНИЕ

Вопросам воспламенения и горения мелких (микро- и наноразмерных) частиц алюминия посвящена обширная литература. Интерес к данным проблемам обусловлен перспективами использования этих объектов в составе смесевых твердых топлив для улучшения характеристик зажигания, горения, повышения эффективности горения и т. д. [1–3]. В [4, 5] отмечается противоречивое влияние добавок нано- и микрочастиц алюминия на характеристики различных взрывчатых веществ, что не имеет пока достаточно убедительных объяснений. В последние годы появились многочисленные исследования, посвященные наблюдениям и теоретическому описанию горения наноразмерных частиц и анализу сопутствующих процессов (плавления, диспергирования, кластеризации и т. д.). При этом количество работ, в которых затронуты вопросы детонации газовых сред в присутствии наночастиц или газовзвесей субмикронных или наноразмерных частиц, невелико. Для замыкания физико-математических моделей гетерогенной детонации требуется адекватное описание процессов межфазного взаимодействия. В настоящем обзоре проанализированы работы, относящиеся к воспламенению и горению частиц

алюминия в газовых средах в детонационных и ударных волнах. Кроме того, затронуты вопросы теплофизических свойств, а также особенностей теплообмена и сопротивления наноразмерных частиц в динамических условиях волновых течений.

Для большинства проблем ударно-волновых и детонационных явлений в газовзвесах мелких частиц теоретическое описание базируется на подходах механики сплошных/гетерогенных сред [6–11]. При этом основные уравнения выражают законы сохранения массы, импульса и энергии для каждой фазы и каждого компонента, дополняются уравнениями состояния и замыкаются соотношениями для описания процессов массообмена между компонентами (плавления, испарения, конденсации, воспламенения и горения), обмена импульсами (силы сопротивления) и теплообмена между газом и частицами. Эти подходы могут быть использованы для описания смесей газов с микро- и наноразмерными частицами при адекватном учете молекулярных эффектов в процессах межфазного взаимодействия.

В случае одномерных нестационарных течений слабозапыленных реагирующих газовзвесей уравнения имеют вид [12, 13]:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_1 u_1)}{\partial x} = J_2, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_2 u_2)}{\partial x} = -J_2,$$

$$\frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho_1 u_1^2)}{\partial x} = -f_2 + J_2 u_2,$$

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 16-08-00778).

© Фёдоров А. В., Хмель Т. А., 2019.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2^2)}{\partial x} &= f_2 - J_2 u_2, \\
 \frac{\partial \rho_1 E_1}{\partial t} + \frac{\partial [\rho_1 u_1 (E_1 + p/\rho_1)]}{\partial x} &= \\
 &= -q_2 - f_2 u_2 + J_2 E_2, \\
 \frac{\partial \rho_2 E_2}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_2 E_2)}{\partial x} &= q_2 + f_2 u_2 - J_2 E_2, \\
 p &= \rho_1 R T_1, \\
 E_1 &= \frac{u_1^2}{2} + c_{v,1} T_1, \quad E_2 = \frac{u_2^2}{2} + c_{v,2} T_2 + Q.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь индекс 1 относится к газу, 2 — к частицам. Используются следующие обозначения: p — давление; $\rho_i = m_i \rho_{ii}$, u_i , E_i , T_i , $c_{v,i}$, m_i , ρ_{ii} — соответственно средняя плотность, скорость, полная энергия единицы массы, температура, теплоемкость, объемная концентрация, истинная плотность i -го компонента ($i = 1, 2$); f , J , q — сила межфазного взаимодействия, массообмен и удельный тепловой поток межфазного теплообмена; R — универсальная газовая постоянная; величина Q включает в себя тепловой эффект приведенной кинетики реакции горения частиц, а также затраты тепла на плавление и испарение материала частиц.

Большинство моделей детонации газовых смесей и газозвесей твердых частиц базируется на описании горения в рамках моделей приведенной кинетики. Это позволяет получать гидродинамические картины течения в макромасштабах, отвечающих размерам технических устройств или объемам пространства при исследовании взрывных процессов. Применение детальных многостадийных кинетических схем для условий нестационарных неоднородных течений гетерогенной детонации не всегда оправдано. Известные из литературы константы реакций определены для ограниченных диапазонов давления и температуры, а кинетические схемы, как правило, верифицированы для условий ламинарного распространения пламени. В детонации эти параметры меняются в широких пределах и их значения могут выходить за границы условий определения констант. При большом количестве реакций и высокой энергии активации отклонения могут быть значительными. Опыт численного моделирования ячеистой газовой детонации показывает, что упрощенные модели более успешно

воспроизводят размер ячейки, чем модели детальной кинетики.

В теоретических подходах построения математических моделей приведенной кинетики для описания горения частиц минимальным числом химических реакций основные принципы состоят в корректном представлении критерия воспламенения, а также характеристик массообмена, теплообмена и тепловыделения. В связи с этим большой интерес представляют экспериментальные данные по горению и детонации газозвесей алюминия, позволяющие провести верификацию моделей по совокупности различных параметров. Для построения моделей детонационного горения взвесей алюминия в рамках приведенной кинетики необходимо принимать во внимание особенности воспламенения и горения частиц различной дисперсности за ударными волнами.

1. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ МИКРОДИСПЕРСНЫХ ВЗВЕСЕЙ

1.1. Механизмы горения микроразмерных частиц алюминия

Вопросам горения мелкодисперсных частиц алюминия ($10 \div 300$ мкм) посвящено множество экспериментальных и теоретических работ, обзор которых можно найти в [14, 15]. В [14] проведен анализ данных по горению одиночных частиц в воздухе в статических условиях (в пламени горелки). Установлена степенная зависимость времени горения от диаметра частиц с показателем степени $1.5 \div 2$ [14]. В подавляющем большинстве твердые продукты сгорания представляют собой мелкие сферические частицы, состоящие из оксида алюминия. Отмечается отсутствие в конечных продуктах субоксидов AlO и Al_2O . Напротив, данные термодинамических расчетов [16] и термодинамический анализ детонации [17] показывают присутствие в продуктах детонации субоксидов, подтверждая, что детонационное горение частиц алюминия существенно отличается от горения в статических условиях.

Авторы [14] склоняются к представлению горения частицы алюминия в парофазном режиме, основанному на гипотезе Глассмена [18]. Приведено изложение ряда моделей горения в рамках этой концепции, в частности модель [19], особенностью которой является учет ча-

стичной диффузии парофазных продуктов сгорания к поверхности металла.

Экспериментальные наблюдения горения частиц алюминия в составе ракетных топлив проводились также в [20, 21] и описаны в [22], где отмечается противоречивый характер многих аспектов процесса. Одним из основных промежуточных процессов является взаимодействие металла с оксидом алюминия (Al_2O_3) с образованием газообразных продуктов (Al и AlO). В [22] построена модель горения одиночной частицы алюминия в кислороде, где важную роль в окислении алюминия играет наличие оксидной пленки, которая, с одной стороны, препятствует взаимодействию алюминия и кислорода, сокращая реагирующую поверхность, а с другой стороны, участвует в процессе окисления алюминия с образованием промежуточного продукта AlO . Накопление и прорыв газообразного субоксида AlO способно привести к нарушению целостности оксидной пленки и установлению несимметричной зоны горения. (Возможность нарушения симметрии при горении частицы алюминия обсуждалась в [14].)

Модификация парофазной модели горения частицы алюминия на основе представлений [18, 19] описана в [15]. В этой работе конденсация оксида представляется происходящей на поверхности частицы с формированием несимметричного образования («колпачка»).

В [23, 24] приведена физико-математическая модель горения, в которой принимается во внимание накопление оксида на поверхности частицы алюминия. Результаты расчетов в рамках модели [24] с учетом кинетики испарения и поверхностных химических реакций хорошо согласуются с данными экспериментов [14, 25] по зависимости времени горения от давления и концентрации окислителя и находятся в пределах разброса данных по зависимости времени горения от размера частиц.

Особенности горения крупных ($80 \div 250$ мкм) одиночных частиц алюминия в кислороде и кислородосодержащих средах отмечены в работах [26–28]. В [26, 27] показано, что горение алюминия проходит в несколько стадий. Первая протекает при температуре порядка 3000 К и, скорее всего, в парофазном режиме. На второй стадии температура уменьшается до 2800 К, горение асимметрично, частица вращается, что связывают с появлением оксидной «шапочки»

на поверхности. На третьей стадии излучение уменьшается, температура падает до 2300 К, происходит накопление оксида на поверхности (что подтверждено дополнительными экспериментами в условиях микрогравитации и анализом состава частицы на разных стадиях горения в [27]). В [28] для горения частиц алюминия в чистом кислороде или смесях кислорода с азотом, аргоном и гелием установлена квадратичная зависимость времени горения от диаметра частиц. В чистом кислороде время горения в несколько раз меньше, чем в воздухе. Также показано, что изменение толщины пленки оксида сравнимо с размером частиц.

Для горения алюминия в составе смесевых топлив получена зависимость времени горения от диаметра с более низким показателем степени — до 1.5 [14]. В [29] экспериментально установлена зависимость с показателем 1.65 ± 0.55 , причем скорость горения мало меняется при изменении концентрации кислорода, но линейно зависит от давления в рассматриваемом интервале измерений. Факт слабой зависимости скорости горения от концентрации кислорода позволил авторам сделать вывод о том, что кислород, возможно, не является первичным окислителем при горении алюминия в составе ракетных топлив. Расчеты авторов показывают более высокие скорости взаимодействия алюминия с другими реагентами — CO_2 и H_2O .

Обширный обзор данных по времени горения частиц алюминия в воздушных и кислородных средах приведен в [30]. Из анализа зависимостей можно заключить, что показатель степени 1.5 более справедлив для воздушных смесей, а для кислородных — близкий к 2. Однако распространение этой зависимости на интервал размеров частиц $1 \div 10$ мкм под вопросом. В [31] представлена модель горения одиночной частицы алюминия в различных окислительных средах, основанная на кинетических механизмах гетерогенных (поверхностных) и газофазных реакций с образованием субоксидов, учетом конденсации и диссоциации. Численные расчеты и сопоставления с данными экспериментов проводились для сравнительно крупных частиц ($60 \div 230$ мкм) в условиях турбулентного течения в следе.

В работах [32, 33] представлены данные по горению частиц алюминия размером до 10 мкм в различных условиях, подтверждающие пере-

ходный характер режима горения. В [32] установлено, что в зависимости от условий экспериментов смена режима горения может происходить при более крупных, чем 10 мкм, размерах частиц. В [33] представлены экспериментальные данные, которые указывают, что переходный режим от диффузионно-лимитированного газофазного горения частиц алюминия к кинетическому начинается при размере частиц 10 мкм и давлении 8.5 атм. Измерение времени горения пыли с размером частиц 10 и 2.8 мкм показывает, что показатель степени в зависимости времени горения от диаметра частиц порядка 1 в средах с углекислым газом и уменьшается до 0.7 в смесях кислорода с азотом.

Скорость горения микронных частиц зависит также от давления. В [34] экспериментально исследовалось горение частиц размеров 3 и 11 мкм. По результатам экспериментов установлены корреляции для зависимости времени горения от давления P , содержания кислорода X_{O_2} и диаметра частиц d : $t_b = a_0 X_{O_2}^{a_1} (P/P_0)^{a_2} d^n$, где для кислорода $a_1 = 0.5$, $a_2 = -0.5$, $a_0 = 200$ мкс, d — [мкм]. Для показателя степени определена универсальная формула $n = 2 \exp(-4.3 X_{O_2})(P/P_0)^{-0.3}$.

1.2. Математические модели горения микродисперсных взвесей в динамических условиях

Теоретические подходы для описания горения взвесей частиц алюминия в условиях за ударными и детонационными волнами развиваются с середины 80-х годов прошлого столетия. В [11] была предложена модель взаимопроникающих континуумов с уравнением приведенной кинетики аррениусовского типа. При этом учитывалось неполное сгорание частиц, обусловленное как недостатком окислителя, так и накоплением оксида на поверхности частицы. Связь предэкспонента с размером частицы не устанавливалась.

Одновременно модель воспламенения и горения частицы алюминия за ударными волнами была представлена в [35] и позже в [36]. Учитывались такие факторы, как плавление и испарение частицы, образование Al_2O , конденсация Al_2O_3 . Горение частицы контролировалось диффузией в пределах приведенной пленки. В рамках модели рассмотрены задачи воспламенения и сгорания частиц за ударными волнами, однако расчетов и анализа детонационных структур и сравнений с данными экспериментов по детонации не проводилось.

Описание горения при моделировании детонации в газовзвеси частиц алюминия в водородокислородных или водородовоздушных смесях с добавками алюминия [37, 38] и в воздухе и кислороде [39] сделано на основе представлений [14]. Для скорости реакции принималась формула, приведенная в [14], с константой, определенной в [25], $\tau_T = K \frac{d^{1.5}}{(a_k)^{0.9}}$. Отметим, что в [25] данная формула получена из обработки экспериментальных данных по горению алюминия в составе продуктов сгорания конденсированных систем, где основными кислородосодержащими реагентами являются H_2O и CO_2 . В [38, 39] наличие и роль покрывающей частицу оксидной пленки не учитывались, а конденсированные продукты реакции (состоящие из мелких частиц диоксида алюминия, идентичного оксидной пленке) рассматривались как часть газовой фазы. При достижении точки кипения диоксида алюминия учитывалась возможность его разложения на субоксиды.

Модель детонации [38] использовалась авторами [40] при численном моделировании двумерных процессов в гетерогенной детонации газовзвеси алюминия. В [40] указано, что в качестве несущей фазы рассматривается кислород, а принятое значение концентрации частиц 0.3 кг/м^3 в несколько раз меньше стехиометрического. Полученная численно скорость детонации (1.74 км/с) соответствует термодинамическим расчетам [39, 41].

Простая двухшаговая модель приведенной кинетики для описания детонационного горения частиц алюминия в кислороде с учетом декомпозиции оксида алюминия анализировалась в [42]. Проведены параметрические исследования влияния параметров на результаты моделирования детонационных структур Чепмена — Жуге и ячеистой детонации. Установлено слабое влияние константы, определяющей скорость реакции, на детонационную структуру, при этом значительную роль играет выбор температуры, при которой происходит декомпозиция оксида алюминия на субоксиды.

В работах [43–50] использовалась модель детонационного горения взвеси алюминия в кислороде с одним уравнением приведенной кинетики аррениусовского типа. Выражение для описания массообмена J в уравнениях (1) имеет вид

$$J = \begin{cases} \frac{\rho}{\tau_{\xi}}(\xi - \xi_k) \exp\left(-\frac{E_a}{RT_2}\right), & T_2 \geq T_{ign}, \xi \geq \xi_k, \\ 0, & T_2 < T_{ign} \text{ либо } \xi < \xi_k. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь ρ — плотность смеси в целом, ξ_k — остаточная относительная массовая концентрация несгоревших частиц. Процесс формирования на поверхности оксида алюминия (в форме «шапочки» или пленки), препятствующего полному сгоранию частицы, моделировался введением члена ξ_k в уравнение для концентрации частиц. Константы модели обеспечивают согласование результатов термодинамических расчетов скорости детонации [41], энергии инициирования и оценочно размера детонационной ячейки с данными экспериментов [51]. Принята квадратичная зависимость времени горения частицы алюминия от ее размера соответственно данным по горению в чистом кислороде [25, 27], эта зависимость была распространена также на частицы в диапазоне размеров $1 \div 10$ мкм. Характерную константу скорости горения выбирали таким образом, чтобы обеспечить соответствие экспериментальным данным [25]. Образование субоксидов алюминия учитывалось интегрально (тепловыделение с учетом затрат на декомпозицию оксида определялось из эмпирических данных по скорости детонации). В рамках модели получены структуры детонации Чепмена — Жуге, сценарии инициирования детонации, двумерные течения при взаимодействии ударной волны с ограниченными облаками частиц, течения ячеистой детонации в каналах постоянной и меняющейся геометрии в монодисперсных и полидисперсных взвесах частиц алюминия в кислороде. Результаты согласуются с известными экспериментальными и расчетными данными других авторов по характерным масштабам ячеистых структур, энергии инициирования и другим характеристикам детонации.

Детонация воздушных взвесей частиц алюминия исследовалась также в работах [52, 53]. В [52] представлены данные экспериментов по распространению спиновой детонации в газозвесах частиц алюминия размером 100 нм и 2 мкм при различных давлениях. Обсуждается зависимость критического диаметра трубы или размера детонационной ячейки от диаметра частиц; указано, что в диапазоне размеров $1 \div 2$ мкм показатель степени в зави-

симости от диаметра значительно меньше 2 (по приведенным оценкам — 1.3 в диапазоне 100 нм \div 2 мкм). В [53] эти и другие данные экспериментов этих же авторов использованы для построения полуэмпирической модели детонации с гибридной приведенной кинетикой, также используемой в [54]. Особенность гибридной кинетической модели состоит в учете двух типов реакций — диффузионной и аррениусовской. Скорость диффузионной реакции зависит от радиуса по степенному закону (с показателем -2), скорость кинетической — не зависит. Характерное время горения частицы определяется суммой (т. е. скорость гибридной реакции равна среднему геометрическому двух скоростей). Модель, таким образом, учитывает переход от диффузионного типа горения (характерного для крупных частиц при высоких температурах) к кинетическому типу (свойственному горению мелких или крупных частиц при низких температурах). Оценки показывают, что в детонационном горении (при температуре порядка 2000 К) переход от одного режима к другому происходит в интервале размеров частиц 100 нм \div 10 мкм. При всей привлекательности, в данной модели имеются некоторые недостатки. Принимается, что и на стадии низкотемпературного окисления (воспламенения) тепловыделение реакции происходит в газовой фазе, т. е. нагрев частиц определяется только конвективным теплообменом. Кроме того, тепловой эффект реакции определен без учета возможности образования субоксидов алюминия (декомпозиции оксида), что приводит к чрезмерно высоким расчетным значениям равновесной температуры продуктов детонации (5000 К). Одним из параметров неопределенности является значение энергии активации кинетической реакции. Проведенные параметрические расчеты ячеистой детонации показали сильную зависимость размера и характера детонационной ячейки от этого параметра. Из сравнения расчетных и экспериментальных данных по периоду пульсаций установлено значение энергии активации 95 кДж/моль.

В [55, 56] принципы описания горения частицы в рамках гибридной модели [53] использовались в моделировании ячеистой и спиновой детонации на основе двумерных [55] и трехмерных [56] расчетов. Размер частиц варьировался в пределах $1.5 \div 20$ мкм. Сравнение результатов расчетов по двухшаговой модели [38, 41] и гибридной модели показало, что различий в

определении времени горения и размера расчетной детонационной ячейки в зависимости от размера частиц практически нет [55]. Длины зоны индукции воспламенения различаются, но в двухшаговой модели длина зависит от выбора температуры воспламенения.

Перечисленные в данном разделе теоретические работы касаются микроразмерных взвесей частиц алюминия, включая взвеси хлопьевидных частиц (диаметром $25 \div 40$ мкм и толщиной около 1 мкм), анализ которых основан на рассмотрении сферических аналогов «эквивалентного» диаметра [53, 55, 56].

1.3. Механизмы воспламенения частиц алюминия в динамических условиях

Математическое моделирование процессов детонации требует адекватного описания стадии воспламенения, протекающей в условиях скоростной и тепловой неравновесности. Исследования воспламенения алюминия проводились преимущественно в статических условиях медленного нагрева. В [14] отмечается, что воспламенение может происходить в момент разрушения оксидной пленки. При медленном нагреве тепловое расширение металла сопровождается реакциями поверхностного окисления, восстанавливающими сплошность оксидного покрытия. Более быстрый нагрев приводит к появлению возмущений поверхности при температуре около 950 К и последующему растрескиванию. Это дает основания сделать вывод о вероятности процесса воспламенения при температурах ниже температуры кипения металла. Отмечается также, что при высокоскоростных режимах нагрева поверхность алюминия может частично обнажаться, что облегчает испарение или прямой контакт металла с окислительной средой. Данные по температуре воспламенения приведены в [14] для статических условий медленного нагрева. Тем не менее анализ этих данных позволил сделать вывод о возможности воспламенения при температурах порядка 1300 К, что намного ниже точки плавления оксида алюминия.

При быстром нагреве воспламенение может происходить и при более низких температурах. Оксидная пленка в нормальных условиях (при температуре около 300 К) представляет собой аморфный оксид Al_2O_3 . При нагреве (достижении частицей температуры $\approx 500 \div 600$ °С) аморфный оксид трансформируется в кристаллический, при этом значи-

тельно снижаются защитные свойства оксидной пленки [57, 58]. Кроме того, нарушение ее целостности (растрескивание) становится возможным при быстром нагреве в силу трехкратного различия коэффициентов линейного расширения алюминия и оксида алюминия [59], это может происходить уже при 500 °С. Таким образом, на поверхности частицы появляются участки, не покрытые оксидом, что способствует иницированию реакции окисления алюминия. На стадии воспламенения реакция окисления протекает с образованием твердого оксида непосредственно на поверхности частицы. Тепло от реакции низкотемпературного окисления поступает в частицу, т. е. полностью расходуется на ее нагрев и плавление. Возможность низкотемпературного воспламенения микроразмерных частиц алюминия в ударных волнах также указана в работе [60]. Кроме того, в [60] отмечено наличие компонента AlO непосредственно после прохождения ударной волны, что указывает на возможность образования субоксидов алюминия при температурах ниже точки кипения оксида алюминия.

1.4. Моделирование воспламенения частиц в детонационных процессах

В [11] развита физико-математическая модель воспламенения и горения газовзвесей частиц металлов при различных условиях, в том числе и в детонационных волнах. Обсуждаются три механизма воспламенения частиц алюминия в динамических условиях за ударными и детонационными волнами: тепловой взрыв, достижение критической температуры и дробление частиц. Выявлены области начальных параметров, определяющие тот или иной механизм воспламенения. В [61] представлена модель воспламенения алюминия, основанная на представлениях о диффузии окислителя через пленку оксида, описывающая два экспериментальных параметра: предельную температуру воспламенения и время задержки воспламенения в зависимости от радиуса частицы.

Математическое моделирование процессов воспламенения частиц в ударных волнах и волнах газовой детонации с учетом предпламенного окисления и плавления проводилось в работах [35, 36]. В [35] рассмотрено ограничение при приближении одиночных частиц, а в [36] анализировалось влияние концентрации

частиц на воспламенение газозвеси. В расчетах в рамках данной модели не обнаружено срыва теплового равновесия в рассматриваемых условиях воспламенения, переход к диффузионному режиму горения частицы связывался с достижением частицей температуры плавления оксидной пленки 2300 К, что не согласуется с критериями воспламенения гибридной и гетерогенной детонации взвесей алюминия в [37–39]. В [36] не приведено сравнения с экспериментальными данными, а сопоставление данных [36] с результатами экспериментов [62] по определению времени задержки воспламенения газозвеси алюминия со средним диаметром частиц порядка 10 мкм показывает значительное превышение полученных авторами [36] расчетных значений ($100 \div 200$ мкс) над экспериментальными [62] ($20 \div 40$ мкс).

В модели [38] для частиц алюминия также принят температурный критерий воспламенения. Критическая температура воспламенения задана равной 1350 К, что существенно ниже точки плавления оксидной пленки. Однако это позволило обеспечить лучшее согласование с данными экспериментов по скорости детонации и воспламенению частиц, чем значение, отвечающее предельной температуре воспламенения частицы в статических условиях [63]. В [38] обсуждаются некоторые известные физические механизмы, обуславливающие низкотемпературное воспламенение частиц в динамических условиях (ударных волнах), в частности, нарушение целостности оксидной пленки в силу различия в коэффициентах линейного расширения алюминия и его оксида. Модель [38] применялась для анализа гетерогенной детонации воздушных и кислородных взвесей частиц алюминия в [39], где стационарное распространение детонационной волны со скоростью около 1600 м/с (соответствующей экспериментам [51]) удалось получить в расчетах только при температуре воспламенения 950 К.

В [64] проведено численное исследование воспламенения взвеси частиц алюминия за отраженными ударными волнами, где использовалась модель [38] с критерием воспламенения $T_{ign} = 1350$ К. Это же значение температуры воспламенения принималось в [40] при численном моделировании ячеистой детонации в бедных взвесах частиц алюминия в кислороде (скорость стационарной детонации 1735 м/с).

В модели, используемой в работах [43–49], воспламенение описывается по упрощен-

ной схеме: пренебрегается плавлением частицы и тепловыделением низкотемпературных реакций окисления частицы. В качестве температурного критерия воспламенения принято значение $T_{ign} = 900$ К, что ниже точки плавления, но близко к принятому в [39] значению температуры воспламенения 950 К. Анализ стадии воспламенения газозвеси частиц алюминия в волне гетерогенной детонации проведен в [50] в рамках модели [43–49] и модели [35] с учетом плавления частиц и предпламенного окисления. На основе сравнения результатов между собой и с данными ряда экспериментов по воспламенению в проходящих, отраженных ударных волнах и в детонационных процессах дано обоснование температурного критерия воспламенения и адекватности выбора критической температуры $T_{ign} = 900$ К для описания детонации взвесей алюминия в кислороде.

2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ НАНОДИСПЕРСНЫХ ВЗВЕСЕЙ АЛЮМИНИЯ

2.1. Особенности воспламенения и горения субмикронных и наноразмерных частиц алюминия

Переход к наноразмерным взвесям требует анализа особенностей воспламенения и горения частиц алюминия нанометрового диапазона размеров. В этом параграфе будет приведен обзор данных по воспламенению и горению частиц алюминия субмикронных и нанометровых размеров как в статических условиях, так и за ударными волнами. Наибольший интерес вызывают данные, на основе которых можно построить упрощенные модели приведенной кинетики детонационного горения.

В [65, 66] представлены данные ряда экспериментов различных авторов, указывающие на снижение температуры воспламенения при уменьшении размера частицы алюминия. Воспламенение при температурах около 900 К может происходить уже для частиц размером менее 500 нм, что может быть связано с размерным эффектом.

В [66] также приведен обширный обзор данных по горению частиц алюминия в нанометровом диапазоне размеров. Из анализируемых в [66] экспериментальных данных видно, что переход от диффузионно-лимитированного горения к кинетическому режиму происходит плавно, т. е. существует переходная зона. В

диапазоне размеров частиц $1 \div 10$ мкм может сохраняться диффузионный режим горения или наблюдаться переходный режим в зависимости от условий. Степенная зависимость времени горения частиц менее 1 мкм от диаметра характеризуется значительно меньшим показателем степени.

В работе [67] приведены данные экспериментов по горению наноразмерных частиц алюминия различного диаметра ($19 \div 150$ нм) в воздухе в условиях аэрозольного потока в реакторе. Время горения измерялось посредством масс-спектрометрии одиночной частицы. Установлено, что время горения уменьшается с уменьшением размера частиц, также уменьшаются вычисленные аппроксимирующие значения энергии активации аррениусовской реакции (от $120 \div 175$ кДж/моль для $100 \div 150$ нм до $25 \div 32$ кДж/моль для 19 нм). Отмечено, что частицы размером 19 нм сгорают практически полностью уже при температуре около 900 К, при размерах более 50 нм сгорают лишь частично даже при 1100 К. Авторы, тем не менее, утверждают, что горение контролируется диффузионным процессом.

В [68] представлены данные измерений параметров горения частиц алюминия размером около 80 нм за отраженной ударной волной (диапазон давлений $4 \div 32$ атм и температур $1200 \div 2100$ К) в окислительных средах, содержащих кислород, углекислый газ и азот. Длительность горения, определяемая по свечению, составила $50 \div 500$ мкс в зависимости от условий. Для смеси кислорода с азотом (50/50 %) экспериментальные зависимости времени горения от температуры хорошо описываются реакциями аррениусовского типа. Время горения также зависит от давления (сокращается в $1.6 \div 4$ раза при увеличении давления с 8 до 32 атм). Энергии активации реакций горения определены различными при давлениях 8 и 32 атм. Также установлена зависимость времени горения от содержания кислорода в смеси с азотом в интервале $10 \div 50$ %. Замена кислорода углекислым газом в качестве окислителя показала качественно отличные тенденции в зависимостях времени горения от температуры.

Ряд экспериментальных данных по горению частиц алюминия в широком диапазоне параметров, включая нанометровый диапазон размеров частиц, представлен в работе [69]. Воспламенение частиц размером менее 1 мкм

происходит при температуре около 900 К, а зависимость времени горения от диаметра с показателем степени 0.3 хорошо коррелирует с данными экспериментов. Авторы считают, что уменьшение показателя степени ниже 1 может быть связано с образованием агломератов из наноразмерных частиц, которые определяют наблюдаемое время горения в экспериментах. Отмечается также сильная зависимость времени горения от температуры, в отличие от горения микронных частиц.

Обзор и обсуждение данных по горению различных наночастиц, в том числе и алюминия, изложены в [70]. Представлена классификация режимов горения на основе термодинамических соотношений, обсуждаются условия диффузионного и кинетического режимов, вопросы образования и применения порошков.

В [71] рассматриваются механизмы нагрева, воспламенения и горения частиц в статических условиях нагрева, когда определяющим механизмом воспламенения и горения является диффузия окислителя через пленку оксида. Сравнение теоретических и представленных в работе экспериментальных данных указывает, что горение наноразмерных частиц не контролируется диффузией и в то же время не подчиняется в целом законам свободномолекулярного режима горения. Отмечается, что кинетические константы, необходимые для построения модели горения, недостаточно изучены. Кроме того, имеется несколько важных феноменов, таких как спекание и агломерация частиц и растрескивание оксидной пленки, которые должны приниматься во внимание при сравнении с экспериментами.

В работе [72] экспериментально исследовалось горение частиц алюминия порядка 100 нм в воздухе в статических атмосферных условиях. Изучалось влияние условий на конечные продукты сгорания частиц. Самоподдерживающееся распространение волны горения наблюдалось при концентрации около 0.1 г/см³ и низкой температуре. Отмечается, что необходимо принимать во внимание реакции с образованием как оксида Al_2O_3 , так и субоксида Al_2O , который затем взаимодействует с азотом с образованием AlN . При низкой температуре тепло выделяется при образовании Al_2O_3 , Al_2O и AlN , а при высокой температуре экзотермической является лишь реакция с образованием Al_2O_3 . Влияние реакций алюминия с азотом прослеживается из сопоставления данных в об-

зоре [30], где горение крупных частиц в воздухе и в чистом кислороде различается наклоном прямых (т. е. показателем степени в зависимости времени горения от диаметра частицы).

2.2. Теоретические модели воспламенения и горения наночастиц алюминия

В литературе до сих пор нет единого мнения и полной ясности о механизмах горения наночастиц [66]; представленные различными авторами модели описывают как диффузионные механизмы, так и кинетические.

В [73] теоретически исследовалось горение в воздухе частиц микро- и нанометрового диапазонов. Расчетные значения скорости распространения пламени и распределения температуры во фронте пламени получены на основе численного решения уравнения сохранения энергии. Скорость горения частицы моделировалась как функция диаметра и температуры окружающей среды. Для частиц субнанометрового диапазона применялось асимптотическое рассмотрение частиц как больших молекул. Получено хорошее соответствие экспериментальным данным. Указано, что с уменьшением диаметра частиц скорость пламени увеличивается и горение переходит от диффузионного типа к кинетическому. Отмечалось также, что ультрамелкие частицы (несколько нанометров) ввиду низкой температуры плавления находятся в жидком состоянии, быстро испаряются и реагируют с окислителем в газовой фазе, т. е. замена твердофазного алюминия его жидким аналогом в начальных условиях не оказывает значимого эффекта на конечные продукты реакции и температуру пламени. Поскольку Al_2O_3 не существует в газовой фазе, была предложена равновесная реакция разложения на субоксиды AlO , Al_2O_2 , AlO_2 . В работе приведены константы 12 реакций кинетической схемы горения алюминия в кислороде.

На основе диффузионных представлений о горении частицы алюминия, авторами [74] предложена простая модель одношаговой кинетики. В предположении постоянства размера частицы в сферических координатах численно исследовано горение одиночной частицы. Выполнен параметрический анализ зависимостей скорости горения от размера частицы. Обсуждаются границы значений коэффициента диффузии.

В [75] теоретически исследуется горение

частицы алюминия размером 80 нм на основе полуэмпирической модели приведенной кинетики аррениусовского типа. Анализируются зависимости предэкспонента, времени горения и энергии активации реакции от температуры окружающей среды. Получено согласование с экспериментальными данными [68] в рассматриваемых диапазонах температуры и давления. Отмечается, что диффузионная модель [74] в сравнении с этими же данными дает в несколько раз более высокую погрешность.

В работах [76–79] развита идея о механизме, при котором воспламенение и начальная стадия горения наночастиц происходят за счет механизма плавления — разлета (melt-dispersion mechanism). Основной принцип заключается в том, что при быстром нагреве (в высокотемпературном потоке и в ударных волнах) термическое расширение алюминия при расплаве приводит к разрыву поверхностной оксидной пленки и формированию расширяющейся внутрь частицы волны. Эта волна аккумулируется в центре и преобразуется в волну разгрузки, что приводит к разрыву частицы на мелкие фрагменты. Горение частицы, таким образом, происходит уже в режиме окисления отдельных молекул (или кластеров) в газовой фазе. Если представление о разрыве оксидной пленки согласуется с данными, подтверждающими воспламенение при температурах, близких к температуре плавления алюминия, то разрыв самой частицы на фрагменты пока не подтвержден экспериментально. Наблюдениями за поведением наночастиц в высокотемпературной инертной среде не обнаружено паров или кластеров алюминия [80].

Модели горения наноразмерных частиц алюминия в различных средах (в составе смесевых топлив и в водной струе), а также вопросы их воспламенения, плавления и т. д. обсуждаются в работах [81–83]. Представленные кинетические схемы относятся преимущественно к окислению в водной среде, но включают в себя реакции окисления с кислородом [82] и модель кластеризации оксида алюминия в продуктах горения [83]. В моделях [81–83] наночастицы не рассматриваются как физические тела конечного радиуса, что отвечает предположениям механизма плавления — разлета [76–79], при котором время горения частицы не зависит от ее размера. Тем не менее расчеты показали хорошее согласование с данными экспериментов по скорости распространения ла-

минарного пламени и с расчетными данными других авторов по структуре зоны горения.

2.3. Описание процессов теплообмена в нановзвесах в динамических условиях

Детонационные течения характеризуются наличием зон тепловой и скоростной релаксации за лидирующей ударной волной. Для адекватного описания условий воспламенения взвеси в динамических условиях необходимо учитывать особенности процесса нагрева частиц. Широко используемые соотношения для конвективного теплообмена сферических частиц в континуальном режиме обтекания имеют вид [7]

$$q_2 = (6m_2\lambda_1/d_2^2)Nu(T_1 - T_2), \quad (3)$$

$$Nu = 2 + 0.6Re^{1/2}Pr^{1/3}, \quad Re = \frac{\rho_{11}d_2|u_1 - u_2|}{\mu_1},$$

где d_2 — диаметр частиц, m_2 — их масса, λ_1 , μ_1 — теплопроводность и динамическая вязкость газа, Nu — число Нуссельта, Pr — число Прандтля (обычно принимается равным 0.7), Re — число Рейнольдса, T_1 , T_2 — температура газа и частиц, u_1 , u_2 — скорость газа и частиц, ρ_{11} — собственная плотность газа. Характерное время тепловой релаксации определяется по формуле

$$\tau_T^{cont} = d_2^2\rho_{22}c_{v2}/(6\lambda_1Nu), \quad (4)$$

где c_{v2} — теплоемкость частиц, ρ_{22} — собственная плотность частиц. Для условий скоростного равновесия (статического нагрева) принимается $Nu = 2$. Такой подход применяется при моделировании процессов воспламенения и горения микроразмерных частиц алюминия.

Однако для наноразмерных частиц процесс нагрева в потоке горячего газа уже не соответствует континуальному режиму обтекания, так как длина свободного пробега и даже размеры молекул газа могут соотноситься с размером частиц [84]. Из приведенных в [84] формул можно оценить, что длина свободного пробега молекул двухатомного газа при нормальных условиях (1 атм, 280 К) составляет около 200 нм и обратно пропорциональна давлению. Следовательно, в этих случаях необходимо учитывать эффекты свободномолекулярного режима обтекания [66].

В обзоре [85] наряду с общими вопросами моделирования процессов в аэрозолях наноразмерных частиц (транспорт, кластеризация и др.) затронуты вопросы теплообмена. Проблемы описания теплового взаимодействия газа и наноразмерных частиц рассматривались также в работах [86–89].

В [86] приведены формулы для конвективного теплообмена в континуальном и свободномолекулярном режимах. Из этих формул следуют выражения для характерных времен тепловой релаксации. В частности, в свободномолекулярном режиме обтекания частицы газом

$$\tau_T^{fm} = \frac{d_2\rho_{22}c_{v2}}{6\alpha p} \sqrt{\frac{8\pi m_g T_1}{k_B}} \left(\frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \right), \quad (5)$$

$$Kn = \frac{RT_1}{\sqrt{2\pi}d_2^2 N_A \rho d_2}.$$

Здесь d_g , m_g — размер и масса молекулы окружающего газа, k_B — константа Больцмана, α — аккомодационный коэффициент, γ_1 — параметр адиабаты газа, N_A — число Авогадро. Влияние выбора представления для аккомодационного коэффициента на результаты моделирования динамики теплообмена анализировалось в [86]. Из сравнения с данными экспериментов в [86] установлено, что для изолированной сферической частицы $\alpha \approx 0.43$, для агрегированных образований частиц эффективное значение этого коэффициента составило $\alpha_{eff} = 0.25$.

В [87, 88] обсуждаются границы применимости континуального или свободномолекулярного режима: при числах Кнудсена менее 0.01 адекватным считается континуальный режим, при числах Кнудсена более 10 — свободномолекулярный режим. В промежутке 0.01 ÷ 10 имеет место переход от одного режима к другому [66]. Для переходного режима в [86] предложено простое выражение

$$\tau_T^{tr} = \tau_T^{fm} + \tau_T^{cont}, \quad (6)$$

которое, наряду с другими аппроксимационными формулами для переходного режима, обсуждается в [87]. Как указано в [88], более точное описание с необходимостью должно основываться на численных расчетах.

В [89] предпринята попытка учесть кривизну поверхности наночастицы и пограничного слоя Кнудсена в тепловой динамике свободномолекулярного и переходного режимов нагрева. В дискуссии отмечается, что предложенный

подход улучшает оценку толщины пограничного слоя Кнудсена. Однако это слабо влияет на общую скорость теплопередачи, и, кроме того, имеются другие источники неопределенности (неоднозначное определение средней длины свободного пробега и транспортных свойств). Возможно, эффект кривизны будет иметь более важное значение для фракталоподобных агрегатов. Выделение пограничного слоя при анализе тепловой динамики в переходном режиме ранее выполнялось в теоретическом исследовании [90]. Предложена явная формула для зависимости коэффициента теплообмена сферической частицы от числа Кнудсена, которая сравнивалась с результатами прямого численного моделирования уравнения Больцмана методом Монте-Карло. Разработанный метод может быть использован для условий высоких температур при произвольных зависимостях теплоемкости и теплопроводности от температуры.

Отметим также работу [91], в которой дан теоретический анализ теплообмена наночастицы алюминия с учетом коррекции коэффициента аккомодации в распределении энергии тепловыделения при горении частицы.

Оценки показывают, что для изолированных частиц размером 1 мкм при атмосферном давлении или частиц размером 100 нм в ударных волнах время τ_T^{fm} может превышать τ_T^{cont} на порядок и выше. Также из формулы (5) можно оценить протяженность зоны тепловой релаксации в ударных и детонационных волнах. Оказалось, что даже для частиц размером 1 нм в условиях ударных волн масштаб этой зоны на два-три порядка превышает толщину реальной ударной волны, составляющую до четырех длин свободного пробега молекул газа [92, 93]. Это позволяет в описании динамики нагрева, воспламенения и горения наночастиц в ударных волнах пренебречь эффектами вязкости и теплопроводности в структуре ударной волны, считая ее идеальным скачком соответственно эйлерову подходу.

Следует отметить, что все работы, касающиеся поведения наночастиц в потоке газа, относятся к условиям обычного нагрева, т. е. к статическим условиям ($Nu = 2$). Между тем за ударными волнами нагрев частиц происходит в условиях скоростной неравновесности. Для континуального режима обтекания это выражается в зависимости скорости теплообмена и, соответственно, характерного времени тепловой релаксации от числа Нуссельта. Для нано-

размерных частиц обычно считается, что число Рейнольдса очень мало, а число Нуссельта равно 2. Однако в ударных волнах, где характерные скорости порядка 10^3 м/с, число Рейнольдса может достигать значения ≈ 50 , а число Нуссельта составляет около 5 для частиц размером 1 мкм, 3 при размере 100 нм и примерно 2.5 при размере 10 нм. Влияние этого фактора на теплообмен в условиях свободногомолекулярного режима является одной из неопределенностей, отмеченных в [89].

2.4. Теплофизические и транспортные свойства наночастиц алюминия в динамических условиях

Для описания скоростной релаксации взвешенных частиц, размер которых сравним со средней длиной свободного пробега молекул газа, в силу сопротивления фаз должен учитываться поправочный коэффициент Каннингема C_C [85, 94]:

$$f_2 = \frac{\rho_2}{\tau_u} (u_1 - u_2), \quad \tau_u = \frac{4d_2\rho_2C_C}{3c_D\rho_{11}|u_1 - u_2|}, \quad (7)$$

$$C_C = 1 + 2Kn[1.257 + 0.4 \exp(-1.1/2Kn)].$$

Существующие и используемые для микроразмерных частиц представления зависимости коэффициента сопротивления от числа Рейнольдса обычно распространяются и на интервал наноразмерных частиц. В [13, 44, 45, 48, 49] коэффициент сопротивления c_D определялся с учетом сверхзвукового обтекания в детонационной структуре:

$$c_D(Re, M_{12}) = [1 + \exp(-0.43/M_{12}^{4.67})] \times (0.38 + 24/Re + 4/\sqrt{Re}), \quad (8)$$

$$Re = \frac{\rho_{11}d_2|u_1 - u_2|}{\mu_1}, \quad M_{12} = \frac{|u_1 - u_2|\sqrt{\rho_{11}}}{\sqrt{\gamma_1 p}}.$$

Отличительной особенностью наночастиц является зависимость теплофизических свойств от размера частицы. Обзор некоторых работ по этим вопросам имеется в [66]. В [66, 95] приведены данные экспериментов по температуре плавления наноразмерных частиц алюминия. Температура плавления начинает сильно отклоняться от основного значения 933 К, соответствующего сплошной среде, при размерах частиц менее 10 нм и достигает 673 К при размерах 3 нм. Такое поведение

подтверждается в экспериментальных исследованиях [96] и в теоретических расчетах методами молекулярной динамики [97, 98]. В [98] анализируется также влияние давления и внутренних дефектов структуры межчастичного пространства в порошке наночастиц алюминия насыпной плотности. В диапазоне $1 \div 300$ атм существенного влияния давления на плавление частиц не обнаружено.

Исследование особенностей плавления частиц алюминия различными методами, включая молекулярно-динамическое моделирование, проводилось в [99–103]. В [99] обсуждаются различные аппроксимации для зависимости температуры плавления от размера частиц. На основе решения задачи Стефана и анализа скорости распространения фронта плавления получены данные по зависимости времени плавления наночастиц алюминия от размера частиц и температуры окружающей среды. В [100] представлены данные по зависимости теплоемкости и теплоты фазового перехода от начального размера и температуры частицы алюминия. Исследования проводились в рамках полуэмпирической модели молекулярной динамики, верифицированной по зависимости температуры плавления от размера наночастиц. Отмечается немонотонная зависимость теплоемкости от температуры, а также увеличение пиковых значений теплоемкости и уменьшение удельной теплоты плавления при уменьшении размера частиц от 10 до 3 нм. При увеличении размера частицы выше 10 нм зависимости указанных теплофизических параметров стремятся к предельным значениям, отвечающим объемной фазе. Сопоставление характеристик плавления наночастицы алюминия, рассчитанных по модели молекулярной динамики и феноменологической модели, показало их неплохое соответствие по времени плавления. Аналогичные результаты получены в [101] методом молекулярной динамики с использованием пакета DL POLY и двух параметризаций потенциала внедренного атома. Отмечается значительный разброс известных экспериментальных и расчетных данных (зависимости температуры плавления от размера наночастиц). На основании сравнения данных, полученных по различным методикам, подтверждена справедливость предложенной в [100] полуэмпирической модели молекулярной динамики для описания тепловой истории наночастицы алюминия. В [102] выполнено молекулярно-динамическое модели-

рование плавления наночастиц алюминия с использованием пакета DL POLY и потенциала внедренного атома для определения коэффициента теплопроводности. Даны аналитические аппроксимации найденных зависимостей теплопроводности и теплоемкости от температуры и размера частиц. В [103] предложена новая физико-математическая модель процесса плавления наноразмерных образцов алюминия, в которой учитываются установленные методом молекулярной динамики зависимости теплофизических переменных от температуры и размера частиц. Для сферической, цилиндрической и плоской симметрии определены зависимости времени плавления нанобразцов алюминия от размера и температуры окружающей среды.

Таким образом, данные перечисленных исследований указывают, что изменение теплофизических свойств наночастиц происходит в интервале размеров меньше 10 нм. С другой стороны, для частиц таких размеров соотношение характерных времен нагрева и плавления (соответственно, задержки воспламенения) и времени горения составляет очень малую величину. Время горения зависит от диаметра как $d^{0.3}$ (и при размерах менее 10 нм перестает зависеть от диаметра), а длительность процессов, протекающих на стадии воспламенения, сокращается пропорционально $d^{1.5} - d^2$, так как уменьшается температура плавления. Поэтому стадия плавления наночастиц размером до 10 нм пренебрежимо коротка и в описании детонации может не выделяться в отдельный процесс.

2.5. Вопросы кластеризации и образования наночастиц в процессе горения алюминия

При исследовании детонационного горения газовзвесей существуют некоторые сопутствующие проблемы: кластеризация и агломерация частиц, образование наночастиц (оксида алюминия) в продуктах детонации и др. Некоторые вопросы агломерации наночастиц алюминия в процессах горения затронуты в обзоре [66]. В частности, кластеризация частиц считается одной из стадий горения наночастиц алюминия согласно механизму расплава — разлета [76–79]. В литературе процессы агломерации рассматриваются преимущественно при изучении горения твердотопливных композиций, содержащих алюминий [104, 105]. Агломерация частиц при горении диспергируемых взрывом облаков микроразмерных частиц алюминия (до

10 мкм) исследовалась в [106]. Основными причинами кластеризации частиц, находящихся в начальный момент в состоянии насыпной плотности, указаны гидродинамические особенности течения при диспергировании, в частности развитие неустойчивости Рихтмайера — Мешкова поверхности облака и образование вихревых колец.

Образованию наночастиц оксида алюминия в продуктах горения алюминия посвящено немного работ. Внимание этим процессам уделяется в последнее время в связи с вопросами устойчивости горения алюминия в составе смесевых топлив. В экспериментах [107] исследовалось медленное низкотемпературное горение частиц алюминия размером $5 \div 15$ мкм в обычных атмосферных условиях и наблюдалось образование агрегатов оксида алюминия размером порядка 1 мкм из первичных частиц в несколько десятков нанометров. Детонация взвеси алюминия характеризуется высокими значениями температуры смеси в зоне горения и в продуктах детонации, достигающих и превышающих температуру декомпозиции оксида алюминия. Хотя данных по фрактальному составу продуктов детонационного горения алюминия нет, термодинамические расчеты продуктов детонации алюминия показывают присутствие субоксидов [17]. То есть параллельно с образованием наночастиц оксида алюминия происходит их испарение и разложение оксида на субоксиды. В большинстве теоретических моделей детонации микроразмерных частиц алюминия образующиеся наночастицы оксида описываются как компонент газовой фазы, а реакции разложения на субоксиды не принимаются во внимание.

Попытка теоретического описания процесса образования и роста зародышей оксида алюминия при детонации проводилась в работе [108]. В теоретических расчетах получены неустойчивые режимы со скачками конденсации, экспериментальные подтверждения которых нам неизвестны. Полуэмпирическая модель образования наночастиц в продуктах горения металлов в рамках континуального описания процессов рассматривалась в [109], но возможности ее применения к детонационному горению алюминия не очевидны. В [83] представлена физически обоснованная модель образования наночастиц оксида в продуктах горения алюминия, которая базируется на принципах межмолекулярных взаимодействий и меха-

низмах кластеризации. Модель дает дискретизированное описание процесса формирования и роста зародышей через последовательность цепных реакций, ввиду чего встраивание ее в модель детонации газовой взвеси в рамках континуальных представлений механики сплошных сред сопряжено с определенными трудностями. В целом, вопросы моделирования образования и роста наночастиц твердого оксида алюминия с учетом его разложения на субоксиды в продуктах детонации газовой взвеси частиц алюминия (в условиях высоких температур и давлений) остаются открытыми.

2.6. Моделирование детонационных процессов в нанодисперсных взвесах частиц алюминия

Модель детонации стехиометрической взвеси в кислороде частиц алюминия нанометрового диапазона размеров представлена в [110] и базируется на описании динамики течения уравнениями механики сплошных сред и уравнением приведенной кинетики химических реакций (формулы (1)–(9)). С учетом переходного характера режима теплообмена в широком диапазоне изменения параметров течения для расчетов тепловой динамики субмикронных и наноразмерных частиц была принята логарифмическая интерполяция представлений из формул (4) и (5):

$$\tau_T^{tr} = [(\log \text{Kn} + 2)\tau_T^{fm} + (1 - \log \text{Kn})\tau_T^{cont}]/3. \quad (9)$$

Описание воспламенения и горения субмикронных и наноразмерных частиц основано на эмпирических данных, представленных в [66, 68–70]. Критерием воспламенения является разрыв оксидной пленки при плавлении алюминия $T_{ign} = T_{melt} = 930$ К, что соответствует механизму воспламенения [78, 79]. В уравнении приведенной кинетики (2) зависимость характерного времени горения от параметров течения и размера частицы принималась в виде

$$\tau_\xi = \tau_0(d/d_0)^{0.3}(p/p_*)^{-m}. \quad (10)$$

Значение энергии активации и показатель степенной зависимости от давления определены в соответствии с данными экспериментов [68] $E_a = 60$ кДж/моль, $m = 0.5$. Интегральное тепловыделение приведенной химической реакции определено на основе эмпирических данных о скорости детонации Чепмена — Жуге [51]. Как показано экспериментально в [52] и теоретически в [41], скорость детонации взвесей частиц

размером менее 10 мкм зависит от состава и не зависит от размера частиц.

В [111] проведен анализ стационарных структур Чепмена — Жуге, пересжатых волн и волн ослабляемой детонации (в квазистационарном подходе). Отмечено значительное превышение масштаба зоны горения над зонами тепловой и скоростной релаксации наноразмерных частиц, а также намного более резкое изменение протяженностей зон горения при изменении амплитуды лидирующей ударной волны, что также обуславливает нерегулярный характер ячеистой детонации в двумерных расчетах. Показано, что эффекты свободномолекулярного обтекания и теплообмена проявляются при размерах частиц до 300 нм, таким образом, при моделировании детонации газозвесей более крупных (субмикронных) частиц можно ограничиться континуальным приближением малых чисел Кнудсена.

В [112, 113] в рамках модели получены некоторые данные численного моделирования двумерных течений ячеистой детонации в плоском канале. Результаты показали укрупнение ячейки и ее нерегулярный характер, что, по видимому, обусловлено почти вдвое более высоким значением энергии активации приведенной кинетики горения по сравнению с принятым в [43–46] значением $E_a = 32$ кДж/моль для описания детонационного горения микро-размерных взвесей. Пиковые давления в тройных точках (амплитуды пульсаций) при этом существенно выше, чем в ячеистой детонации микро-размерных взвесей, что качественно согласуется с данными экспериментов [52]. Таким образом, изменение режима горения от диффузионного (для микро-размерных частиц) к кинетическому (для наноразмерных частиц) обуславливает качественно иные свойства и характеристики течений ячеистой детонации газозвесей частиц алюминия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен обзор теоретических и экспериментальных исследований, относящихся к процессам, протекающим при детонационном горении газозвесей частиц алюминия в газовых окислительных средах. Основной целью обзора является описание подходов и представлений для построения модели детонации газозвеси микро- и наноразмерных частиц алюминия с учетом последних данных по режимам нагрева, воспламенения и горения.

Представлены замыкающие соотношения для уравнений механики гетерогенных сред, описывающих детонационные процессы во взвесах наноразмерных частиц алюминия, отражающие их следующие особенности:

— в описании динамических свойств и теплообмена наноразмерных частиц необходимо учитывать переход от континуального режима обтекания частицы газом к свободномолекулярному;

— воспламенение наноразмерных частиц алюминия происходит при температурах, соответствующих точке плавления алюминия;

— описание горения частиц характеризуется переходом от представлений диффузионного режима к учету кинетического характера (аррениусовской реакции) горения;

— перечислены модели приведенной кинетики для диффузионного режима горения крупных частиц и аррениусовской кинетики горения микро-размерных и наноразмерных частиц алюминия, построенные на основе эмпирических данных;

— отмечены наблюдаемые в экспериментах свойства детонации: скорость детонации микро-размерных и наноразмерных взвесей зависит от концентрации частиц и окисляющей среды и не зависит от размера частиц.

Вопросы кластеризации в продуктах детонации твердого оксида алюминия, его декомпозиции и образования недоокисленных продуктов (субоксидов) при детонационном горении алюминия практически не исследованы. Экспериментальных данных по этим вопросам недостаточно, а немногие существующие теоретические модели требуют анализа и доработки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Громов А. А., Хабас Т. А., Ильин А. П. и др. Горение нанопорошков металлов. — Томск: Дельтаплан, 2008.
2. Рыжонков Д. И., Левина В. В., Дзидзигури Э. Л. Наноматериалы. — М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2008.
3. Zarko V. E. Nanoenergetic materials: A new era in combustion and propulsion. — Elsevier, 2016. — Ch. 1. — P. 1–20.
4. Brousseau P., Anderson C. J. Nanometric aluminum in explosives // Propell., Explos., Pyrotech. — 2002. — V. 27, N 5. — P. 300–306.
5. Zhi J., Shu-Fen L., Feng-Qi Z., Zi-Ru L., Cui-Mei Y., Yang L., Shang-Wen L. Research on the combustion properties of propellants with low content of nano metal powders // Propell.,

- Explos., Pyrotech. — 2006. — V. 31, N 2. — P. 139–147.
6. **Нигматулин Р. И.** Динамика многофазных сред. Ч. 1, 2. — М.: Наука, 1987.
 7. **Яненко Н. Н., Солоухин Р. И., Папырин А. Н., Фомин В. М.** Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. — Новосибирск: Наука, 1980.
 8. **Федоров А. В., Фомин В. М., Гостеев Ю. А.** Динамика и воспламенение газовзвесей. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006.
 9. **Федоров А. В., Фомин В. М., Хмель Т. А.** Волновые процессы в газовзвесах частиц металлов. — Новосибирск: Параллель, 2015.
 10. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Моделирование физических и химических превращений в микро- и наночастицах металлов. — Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2017.
 11. **Медведев А. Е., Федоров А. В., Фомин В. М.** Описание воспламенения и горения смесей газа и твердых частиц методами механики сплошной среды // Физика горения и взрыва. — 1984. — Т. 20, № 2. — С. 3–9.
 12. **Федоров А. В.** Структура гетерогенной детонации частиц алюминия, диспергированных в кислороде // Физика горения и взрыва. — 1992. — Т. 28, № 3. — С. 82–83.
 13. **Федоров А. В., Хмель Т. А.** Численное моделирование инициирования детонации при вхождении ударной волны в облако частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, №1. — С. 114–122.
 14. **Горение порошкообразных металлов в активных средах** / Похил П. Ф., Беляев А. Ф., Фролов Ю. В. и др. — М.: Наука, 1972.
 15. **Гремячкин В. М.** Гетерогенное горение частиц твердых топлив. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2015.
 16. **Фейсел В. М., Папп К. А., Хильденбранд Д. А., Сернка Р. П.** // В сб. ст.: Исследование ракетных двигателей на твердом топливе. — М.: Изд-во иностр. лит., 1963. — С. 175.
 17. **Васильев В. М., Вольперт А. И., Клычников Л. В., Петров Ю. М., Салакатова Л. С., Стесик Л. Н.** Расчет параметров детонации смесей горючих веществ с воздухом // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 3. — С. 127–134.
 18. **Глассмен И.** // В сб. ст.: Исследование ракетных двигателей на твердом топливе. — М.: Изд-во иностр. лит., 1963. — С. 171–174.
 19. **Клячко Л. А.** Горение частицы легкокопящего металла, движущейся относительно газообразного окислителя // Физика горения и взрыва. — 1971. — Т. 7, № 2. — С. 236–241.
 20. **Бабук В. А., Белов В. П., Шелухин Г. Г.** Особенности горения частиц алюминия в составе смесевых конденсированных систем при низких и высоких давлениях // Физика горения и взрыва. — 1981. — Т. 17, № 3. — С. 26–31.
 21. **Бабук В. А., Васильев В. А., Романов О. Я., Марьяш В. И., Толмачев Г. А.** Физико-химические превращения капли $Al-Al_2O_3$ в активном газовом потоке // Физика горения и взрыва. — 1993. — Т. 29, № 3. — С. 129–133.
 22. **Бабук В. А.** Горение металлического горючего в составе ракетных топлив // Внутрикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем. Междунар. школа-семинар, Санкт-Петербург, 20–24 июня 1995: сб. материалов. — СПб.: БГТУ, 1996. — С. 74–84.
 23. **Кирьянов И. М., Малинин В. И., Котельников Е. И., Сухов А. В.** Модель горения частицы алюминия с учетом кинетического фактора // Хим. физика. — 1990. — Т. 9, № 12. — С. 1606–1610.
 24. **Малинин В., Коломин Е., Обросов А., Антипин И.** Особенности процесса горения частиц алюминия при различных параметрах потока активных газов // Внутрикамерные процессы, горение и газовая динамика дисперсных систем. Междунар. школа-семинар, Санкт-Петербург, 20–24 июня 1995: сб. материалов. — СПб.: БГТУ, 1996. — С. 142–147.
 25. **Беляев А. Ф., Фролов Ю. В., Коротков А. И.** О горении и воспламенении частиц мелкодисперсного алюминия // Физика горения и взрыва. — 1968. — Т. 4, № 3. — С. 323–329.
 26. **Dreizin E. L., Trunov M. A.** Surface phenomena in aluminum combustion // Combust. Flame. — 1995. — V. 101. — P. 378–382.
 27. **Dreizin E. L.** Experimental study of stages in aluminum particle combustion in air // Combust. Flame. — 1996. — V. 105. — P. 541–556.
 28. **Dreizin E. L.** On the mechanism of asymmetric aluminum particle combustion // Combust. Flame. — 1999. — V. 117. — P. 841–850.
 29. **Servaites J., Krier H., Melcher J.C., Burton R.L.** Ignition and combustion of aluminum particles in shocked $H_2O/O_2/Ar$ and $CO_2/O_2/Ar$ mixtures // Combust. Flame. — 2001. — V. 125. — P. 1040–1054.
 30. **Бекстед М. В.** Анализ данных по времени горения частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 5. — С. 55–69.
 31. **Бекстед М. В., Лианг У., Паддупаккам К. В.** Математическое моделирование горения одиночной алюминиевой частицы (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 6. — С. 15–33.
 32. **Tanguay V., Goroshin S., Higgins A. J., Zhang F.** Aluminum particle combustion in high-speed detonation products // Combust. Sci. Technol. — 2009. — V. 181. — P. 670–693.
 33. **Bazyn T., Krier H., Glumac N.** Evidence for the transition from the diffusion-limit in aluminum particle combustion // Proc. Combust. Inst. — 2007. — V. 31. — P. 2021–2028.

34. Lynch P., Krier H., Glumac N. A correlation for burn time of aluminum particles in the transition regime/ Proc. Combust. Inst. — 2009. — V. 32. — P. 1887–1893.
35. Афанасьева Е. А., Левин В. А. Воспламенение мелких алюминиевых частиц за детонационными и взрывными волнами // Хим. физика. — 1984. — Т. 3, № 9. — С. 1328–1332.
36. Афанасьева Е. А., Левин В. А. Воспламенение и горение частиц алюминия за ударными и детонационными волнами, Физика горения и взрыва. — 1987. — Т. 23, № 1. — С. 8–14.
37. Khasainov B. A., Veysiére B. Steady, plane, double-front detonations in gaseous detonable mixtures containing a suspension of aluminum particles // Dynamic of Explosions. — 1988. — P. 284–299. — (Prog. Astronaut. Aeronaut.; V. 114).
38. Veysiére B., Khasainov B. A model for steady, plane, double-front detonations (DFD) in gaseous explosive mixtures with aluminum particles in suspension // Combust. Flame. — 1991. — V. 85. — P. 241–250.
39. Борисов А. А., Хасайнов Б. А., Вейссьер Б. и др. О детонации взвесей алюминия в воздухе и кислороде // Хим. физика. — 1991. — Т. 10, № 2. — С. 250–272.
40. Benkewicz K., Hayashi A. K. Two-dimensional numerical simulations of multi-headed detonations in oxygen-aluminum mixtures using an adaptive mesh refinement // Shock Waves. — 2003. — V. 13. — P. 385–402.
41. Veysiére B., Khasainov B. A., Briand A. Investigation of detonation initiation in aluminum suspensions // Shock Waves. — 2008. — V. 18. — P. 307–315.
42. Benkewicz K., Hayashi A. K. Parametric studies of aluminum combustion model for simulations of detonation waves // AIAA J. — 2006. — V. 44, N 3.
43. Федоров А. В., Хмель Т. А. Математическое моделирование детонации алюминиевой пыли в кислороде с учетом скоростной неравновесности частиц // Физика горения и взрыва. — 1997. — Т. 33, № 6. — С. 80–91.
44. Федоров А. В., Хмель Т. А. Взаимодействие ударной волны с облаком частиц алюминия в канале // Физика горения и взрыва. — 2002. — Т. 38, № 2. — С. 89–98.
45. Федоров А. В., Хмель Т. А. Численное моделирование формирования ячейистой гетерогенной детонации частиц алюминия в кислороде // Физика горения и взрыва. — 2005. — Т. 41, № 4. — С. 84–98.
46. Федоров А. В., Хмель Т. А. Формирование и вырождение ячейистой детонации в бидисперсных газовзвесах частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2008. — Т. 44, № 3. — С. 109–120.
47. Кратова Ю. В., Федоров А. В., Хмель Т. А. Дифракция плоской детонационной волны на обратном уступе в газовзвеси // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 5. — С. 95–107.
48. Fedorov A. V., Khmel T. A., Kratova Yu. V. Cellular detonation diffraction in gas - particle mixtures // Shock Waves. — 2010. — N 20. — P. 509–519.
49. Кратова Ю.В., Федоров А. В., Хмель Т. А. Особенности ячейистой детонации в полидисперсных газовзвесах частиц алюминия // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 5. — С. 85–94.
50. Федоров А. В., Хмель Т. А. Характеристики и критерии воспламенения взвесей частиц алюминия в детонационных процессах // Физика горения и взрыва. — 2012. — Т. 48, № 2. — С. 76–88.
51. Strauss W. A. Investigation of the detonation of aluminum powder-oxygen mixtures // AIAA J. — 1968. — V. 6, N 12. — P. 1753–1761.
52. Zhang F., Murray S. B., Gerrard R. B. Aluminum particle-air detonation at elevated pressures // Shock Waves. — 2006. — V. 15. — P. 313–324.
53. Zhang F., Gerrard K. B., Rypley R. Reaction mechanism of aluminum particles — air detonation // J. Propul. Power. — 2009. — V. 25, N 4. — P. 845–858.
54. Teng H., Jiang Z. Numerical simulation of one-dimensional aluminum particle-air detonation with realistic heat capacities // Combust. Flame. — 2013. — V. 160. — P. 463–472.
55. Briand A., Veysiére B., Khasainov B. A. Modelling of detonation cellular structure in aluminium suspensions // Shock Waves. — 2010. — V. 20. — P. 521–529.
56. Khasainov B., Virof F., Veysiére B. Three-dimensional cellular structure of detonations in suspensions of aluminium particles // Shock Waves. — 2013. — V. 23. — P. 271–282.
57. Гуревич М. А., Озерова Г. Е., Степанов А. М. Гетерогенное воспламенение алюминиевой частицы в кислороде и водяном паре // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 3. — С. 327–335.
58. Trunov M.A., Schoenitz M., Zhu X., Dreizin E. L. Effect of polymorphic phase transformations in Al_2O_3 film on oxidation kinetics of aluminum powders // Combust. Flame. — 2005. — V. 140. — P. 310–318.
59. Похил П. Ф., Логачев В. С., Мальцев В. М. О механизме горения частиц металла // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 3. — С. 407–410.
60. Schloffel G., Eichhorn A., Albers H., Mundt Ch., Seiler F., Zhang F. The effect of a shock wave on the ignition behavior of aluminum particles in a shock tube // Combust. Flame. — 2010 — V. 157. — P. 446–454.

61. **Федоров А. В., Харламова Ю. В.** Воспламенение частицы алюминия // Физика горения и взрыва. — 2003. — Т. 39, № 5. — С. 65–68.
62. **Бойко В. М., Папырин А. Н., Поплавский С. В.** Воспламенение газозвесей дисперсных материалов за ударными волнами // Тр. 1 Междунар. коллоквиума по взрываемости промышленных пылей. — Варшава, 1985. — Ч. 2. — С. 188–195.
63. **Гуревич М. А., Лапкина К. И., Озеров Е. С.** Предельные условия воспламенения частицы алюминия // Физика горения и взрыва. — 1970. — Т. 6, № 2. — С. 172–176.
64. **Benkewicz K., Hayashi A. K.** Aluminum dust ignition behind reflected shock wave: two-dimensional simulations // Fluid Dynamic Res. — 2002. — V. 30. — P. 269–292.
65. **Trunov M. A., Schoenitz M., Dreizin E. L.** Ignition of aluminum nanopowders under different experimental conditions // Propell., Explos., Pyrotechn. — 2005. — V. 30, N 1. — P. 36–43.
66. **Сандарам Д., Янг В., Зарко В. Е.** Горение наночастиц алюминия (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 2. — С. 37–63.
67. **Park K., Lee D., Rai A., Mukherjee D., Zachariah M. R.** Size-resolved kinetic measurements of aluminum nanoparticle oxidation with single particle mass spectrometry // J. Phys. Chem. B. — 2005. — V. 109, N 15. — P. 7290–7299.
68. **Bazyn T., Krier H., Glumac N.** Combustion of nanoaluminum at elevated pressure and temperature behind reflected shock waves // Combust. Flame. — 2006. — V. 145. — P. 703–713.
69. **Huang Y., Risha G. A., Yang V., Yetter R. A.** Combustion of bimodal nano/micron-sized aluminum particle dust in air // Proc. Combust. Inst. — 2007. — V. 31. — P. 2001–2009.
70. **Yetter R. A., Risha G. A., Son S. F.** Metal particle combustion and nanotechnology // Proc. Combust. Inst. — 2009. — V. 32, N 2. — P. 1819–1838.
71. **Sundaram D., Puri P., Yang V.** A general theory of ignition and combustion of nano- and micron-sized aluminum particles // Combust. Flame. — 2016. — V. 169. — P. 94–109.
72. **Kwona Y.-S., Gromov A. A., Ilyin A. P., Popenko E. M., Rim G.-H.** The mechanism of combustion of superfine aluminum powders // Combust. Flame. — 2003. — V. 133. — P. 385–391.
73. **Huang Y., Risha G. A., Yang V., Yetter R. A.** Effect of particle size on combustion of aluminum particle dust in air // Combust. Flame. — 2009. — V. 156. — P. 5–13.
74. **Aita K., Glumac N., Vanka S. P., Krier H.** Modeling the combustion of nano-sized aluminum particles // AIAA Paper 2006–1156. — (44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit 9–12 January 2006, Reno, Nevada).
75. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Точечная модель горения наночастицы алюминия в отраженной ударной волне // Физика горения и взрыва. — 2011. — Т. 47, № 3. — С. 47–51.
76. **Levitas V. I., Asay B. W., Son S. F., Pantoya M.** Mechanochemical mechanism for fast reaction of metastable intermolecular composites based on dispersion of liquid metal // J. Appl. Phys. — 2007. — V. 101. — 083524.
77. **Levitas V. I., Pantoya M. L., Chauhan G., Rivero I.** Effect of the alumina shell on the melting temperature depression for aluminum nanoparticles // J. Phys. Chem. C. — 2009. — V. 113, N 32. — P. 14088–14096.
78. **Levitas V. I.** Burn time of aluminum nanoparticles: Strong effect of the heating rate and melt-dispersion mechanism // Combust. Flame. — 2009. — V. 156. — P. 543–546.
79. **Levitas V. I., Pantoya M. L., Dean S.** Melt dispersion mechanism for fast reaction of aluminum nano- and micron-scale particles: Flame propagation and SEM studies // Combust. Flame. — 2014. — V. 161. — P. 1668–1677.
80. **Lynch P., Fiore G., Krier H., Glumac N.** Gas-phase reaction in nanoaluminum combustion // Combust. Sci. Technol. — 2010. — V. 182, N 7. — P. 842–857.
81. **Sharipov A. S., Titova N. S., Starik A. M.** Evaluation of the reaction rate constants for the gas-phase Al—CH₄ — air combustion chemistry // Combust. Theory and Modell. — 2012. — V. 16, N 5. — P. 842–868.
82. **Starik A. M., Kuleshov P. S., Sharipov A. S., Titova N. S., Tsai C.-J.** Numerical analysis of nanoaluminum combustion in steam // Combust. Flame. — 2014. — V. 161. — P. 1659–1667.
83. **Старик А. М., Савельев А. М., Титова Н. С.** Особенности воспламенения и горения композитных топлив, содержащих наночастицы алюминия (обзор) // Физика горения и взрыва. — 2015. — Т. 51, № 2. — С. 64–91.
84. **Савельев И. В.** Курс общей физики. Т. 1: Механика. Молекулярная физика: учеб. пособие. — 2-е изд., перераб. — М.: Наука, 1982. — § 129.
85. **Wang C., Friedlander S. K., Madler L.** Nanoparticle aerosol science and technology: an overview // China Particuology. — 2005. — V. 3, N 5. — P. 243–254.
86. **Kuhlmann S.-A., Reimann J., Will S.** On heat conduction between laser-heated nanoparticles and a surrounding gas // Aerosol Sci. — 2006. — V. 37. — P. 1696–1716.
87. **Liu F., Daun K., Snelling D., Smallwood G.** Heat conduction from a spherical nano-particle: status of modeling heat conduction in laser-induced incandescence // Appl. Phys. B: Lasers and Optics. — 2006. — V. 83. — P. 355–382.

88. **Mohan S., Trunov M. A., Dreizin E. L.** Heating and ignition of metal particles in the transition heat transfer regime // *J. Heat Transfer.* — 2008. — V. 130, N 10. — 104505.
89. **Daun K. J., Huberman S. C.** Influence of particle curvature on transition regime heat conduction from aerosolized nanoparticles // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 2012. — V. 55. — P. 7668–7676.
90. **Filippov A. V., Rosner D. E.** Energy transfer between an aerosol particle and gas at high temperature ratios in the Knudsen transition regime // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 2000. — V. 43. — P. 127–138.
91. **Allen D., Krier H., Glumac N.** Heat transfer effects in nano-aluminum combustion at high temperatures // *Combust. Flame.* — 2014. — V. 161. — P. 295–302.
92. **Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П.** Ударные волны большой амплитуды в газах // *Успехи физ. наук.* — 1957. — Т. IXIII, № 3. — С. 613–641.
93. **Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.** Теоретическая физика. Т. VI: Гидродинамика. — М.: Наука, 1988. — § 93.
94. **Madler L., Friedlander S. K.** Transport of nanoparticles in gases: overview and recent advances // *Aerosol and Air Quality Res.* — 2007. — V. 7, N 3. — P. 304–342.
95. **Lai S. L., Carlsson J. R. A., Allen L. H.** Melting point depression of Al clusters generated during the early stages of film growth: Nanocalorimetry measurements // *Appl. Phys. Lett.* — 1998. — V. 72, N 9. — P. 1098–1100.
96. **Suna J., Simon S. L.** The melting behavior of aluminum nanoparticles // *Thermochim. Acta.* — 2007. — V. 463. — P. 32–40.
97. **Puri P., Yang V.** Effect of particle size on melting of aluminum at nano scales // *J. Phys. Chem. C.* — 2007. — V. 111. — P. 11776–11783.
98. **Puri P., Yang V.** Effect of voids and pressure on melting of nano-particulate and bulk aluminum // *J. Nanopart. Res.* — 2009. — V. 11. — P. 1117–1127.
99. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Математическое моделирование плавления наноразмерных частиц металла // *Физика горения и взрыва.* — 2011. — Т. 47, № 2. — С. 23–29.
100. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Комплексное моделирование плавления наночастицы алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 2013. — Т. 49, № 4. — С. 68–75.
101. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Молекулярно-динамическое моделирование плавления наночастиц алюминия методом внедренного атома // *Физика горения и взрыва.* — 2015. — Т. 51, № 3. — С. 55–59.
102. **Федоров А. В., Шульгин А. В.** Молекулярно-динамическое и феноменологическое моделирование нагрева нанообъекта алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 2016. — Т. 52, № 3. — С. 45–50.
103. **Федоров А. В., Шульгин А. В., Лаврук С. А.** Описание плавления наноразмерных образцов алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 2016. — Т. 52, № 4. — С. 94–100.
104. **Джараман К., Чакраварти С. Р., Сарати Р.** Накопление наноразмерного алюминия при горении твердотопливных композиций // *Физика горения и взрыва.* — 2010. — Т. 46, № 1. — С. 26–35.
105. **Balbudhe K., Roy A., Chakravarthy S. R.** Computer modelling of nano-aluminium agglomeration during the combustion of composite solid propellants // *Proc. Combust. Inst.* — 2015. — V. 35. — P. 2471–2478.
106. **Balakrishnan K., Ukai S., Menon S.** Clustering and combustion of dilute aluminum particle clouds in a post-detonation flow field // *Proc. Combust. Inst.* — 2011. — V. 33, N 2. — P. 2255–2263.
107. **Karasev V. V., Onischuk A. A., Glotov O. G., Baklanov A. M., Maryasov A. G., Zarko V. E., Panfilov V. N., Levykin A. I., Sabelfeld K. K.** Formation of charged aggregates of Al_2O_3 nanoparticles by combustion of aluminum droplets in air // *Combust. Flame.* — 2004. — V. 138. — P. 40–54.
108. **Афанасьева Е. А.** Скачки конденсации при горении газовзвесей частиц алюминия за ударной волной // *Хим. физика.* — 1989. — Т. 8, № 4. — С. 533–538.
109. **Аульченко С. М.** Управление процессом роста наночастиц в проточном плазмохимическом реакторе // *Инж.-физ. журн.* — 2013. — Т. 86, № 5. — С. 967–973.
110. **Khmel T. A., Fedorov A. V.** Detonation structures in gas suspensions of submicron and nano aluminum particles // *Nonequilibrium Processes in Physics and Chemistry. V. II.* — Moscow: Torus-press. — 2016. — P. 131–141.
111. **Хмель Т. А., Федоров А. В.** Моделирование плоских волн детонации в газовзвеси наноразмерных частиц алюминия // *Физика горения и взрыва.* — 2018. — Т. 54, № 2. — С. 71–81.
112. **Khmel T. A., Fedorov A. V., Lavruk S. A.** Two-dimensional detonation flows in gas suspensions of micro- and nanosized aluminum particles // *AIP Conf. Proc.* — 2017. — V. 1893, N 1. — 030143.
113. **Khmel T. A.** Cellular detonations in nano-sized aluminum particle gas suspensions // *J. Phys.: Conf. Ser.* — V. 894, N 1. — 012102.