

ПОДСЕКЦИЯ
«ПРОЦЕССЫ ГОРЕНИЯ, ТЕПЛООБМЕНА И ЭКОЛОГИЯ ТЕПЛОВЫХ
ДВИГАТЕЛЕЙ. ФИЗИКА И ХИМИЯ ГОРЕНИЯ» /
« COMBUSTION, COOLING, HEAT TRANSFER, AND ENVIRONMENTAL
ASPECTS OF THERMAL ENGINES. COMBUSTION PHYSICS AND
CHEMISTRY»

УДК 544.452

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ $\text{BN}_3 + \text{O}_2$

Антонов И.О.^{1,2}, Кузнецова А.А.^{1,2},

¹Самарский университет, г. Самара, nsshishowa@gmail.com

²Самарский Филиал ФИАН, г. Самара

Ключевые слова: бораны, самовоспламенение, поверхность потенциальной энергии, квантово-химические расчеты

Бороводородные соединения (бораны) обладают значительно более высокой удельной теплотой сгорания по сравнению с традиционными углеводородными топливами. Однако их практическое применение ограничено рядом серьезных недостатков, включая высокую токсичность как самих соединений, так и продуктов их сгорания, пирофорность (способность к самопроизвольному воспламенению на воздухе), а также образование твердых оксидов бора, вызывающих эрозию элементов силовых установок.

В последнее десятилетие возрастает интерес к боросодержащим энергоемким ионным жидкостям (ИЖ) как перспективным компонентам топлив для космических аппаратов. Эти соединения сочетают высокие энергетические характеристики с гипергольностью (способностью к самовоспламенению при контакте с окислителями) и пониженной токсичностью. Особый интерес представляют ИЖ, содержащие бороводородные анионы, такие как $[\text{CNBN}_3]^-$, которые демонстрируют минимальную задержку зажигания - критически важный параметр для ракетных топлив. Однако недавние исследования [1-4] показали, что гипергольное воспламенение таких ИЖ происходит исключительно в кислородсодержащей атмосфере, что свидетельствует об определяющей роли взаимодействия боросодержащих фрагментов с молекулярным кислородом в механизме инициирования горения.

Несмотря на важность этих процессов, в литературе практически отсутствуют современные теоретические исследования механизмов самовоспламенения боранов. Существующие модели окисления боранов, разработанные в 1960-70-х годах, основаны преимущественно на эмпирических данных и не учитывают достижения современной квантовой химии.

В данной работе впервые методами *ab initio* исследована поверхность потенциальной энергии реакции борана (BN_3) с молекулярным кислородом. Расчеты выполнены для синглетного и триплетного электронных состояний. Геометрии стационарных точек (реагентов, продуктов и переходных состояний) оптимизированы с использованием функционала wB97XD/6-311G(d,p), с последующим уточнением энергий методом CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12. В докладе будут представлены детальная структура рассчитанных потенциальных поверхностей, анализ возможных механизмов окисления BN_3 , и обсуждение связи полученных результатов с процессами самовоспламенения боранов и боросодержащих ИЖ.

Результаты работы позволяют по-новому взглянуть на молекулярные основы гипергольного воспламенения боросодержащих соединений и могут быть использованы для направленного дизайна новых энергоемких материалов с контролируемыми характеристиками воспламенения.

Список литературы

1. S. Biswas et al., "Unraveling the initial steps of the ignition chemistry of the hypergolic ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium cyanoborohydride ([EMIM][CBH]) with nitric acid (HNO₃) exploiting chirped pulse triggered droplet merging," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 25, no. 9, pp. 6602-6625, 2023.
2. S. Biswas et al., "Hypergolic ionic liquids: to be or not to be?," *Chemical Science*, vol. 15, no. 4, pp. 1480-1487, 2024.
3. S. Biswas et al., "Unraveling the Unusual Chemistry of the Hydrogen-Peroxide-Driven Hypergolic Ignition of a Cyanoborohydride Ionic Liquid as a Next-Generation Green Space Propellant," *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 16, pp. 1831-1839, 2025.
4. S. Biswas, M. Mcanally, S. D. Chambreau, S. Schneider, R. Sun, and R. I. Kaiser, "Atmospheric Ignition Chemistry of Green Hypergolic Bipropellant 1-Ethyl-3-Methylimidazolium

Сведения об авторах

Кузнецова Алина Александровна, аспирант кафедры оптики и спектроскопии.

Антонов Иван Олегович, Ph.D., научный руководитель СФ ФИАН, доцент кафедры оптики и спектроскопии.

COMBUSTION OF IONIC LIQUIDS UNBER ACOUSTIC LEVITATION

A.A. Kuznetsova^{1,2}, I.O. Antonov^{1,2}

¹ Samara University, Samara, Russia, nsshishowa@gmail.com

² Samara Branch of LPI, Samara, Russia

Keywords: boranes, autoignition, potential energy surface, quantum chemical calculations.