

Modelagem da Combustão da Dinitramida de Amônio por Simulação Computacional

Rene Francisco Boschi Gonçalves^{1*} (PG), José Atílio Fritz Fidel Rocco¹ (PQ), Koshun Iha¹ (PQ)

*renefbg@gmail.com

¹ITA – Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Departamento de Química – Praça Mal. Eduardo Gomes, 50 – Vilas das Acácias – São José dos Campos – S.P. – CEP 12228-900.

Palavras Chave: Dinitramida de amônio, cinética química, simulação.

Introdução

A dinitramida de amônio (ADN) está sendo estudada com o objetivo de substituir o perclorato de amônio nas formulações de propelentes sólidos do tipo compósito tendo em vista sua alta energia de decomposição térmica e não geração de produtos de combustão halogenados¹.

Os métodos de simulação computacional podem auxiliar na compreensão de fenômenos e sistemas de diversas áreas do conhecimento científico. Eles possibilitam o desenvolvimento de novos modelos, mais precisos e apurados, aproximando desta forma a teoria da realidade. Em simulações computacionais, os sistemas analisados podem ser controlados com a precisão desejada e condições extremas são acessíveis. Estas condições nem sempre são possíveis ou são mais difíceis de ser atingidas em experimentos laboratoriais².

Com o emprego de modelos pré-existentes do pacote de simulação “Chemkin”, anacronismo de “Chemical Kinetics”, é possível realizar simulações de combustão da ADN em diversas situações, ambientes e sistemas, levando em consideração equações de conservação de massa, energia, espécies químicas envolvidas e, até mesmo, quantidade de movimento. Pode-se assim realizar análises de variações de temperatura e fração molar de espécies químicas em função de vários parâmetros como distância da chama, por exemplo.

Resultados e Discussão

Neste trabalho, a modelagem da combustão da ADN foi realizada com a utilização do módulo “Premix” do pacote de simulação “Chemkin”.

Neste módulo é simulada uma chama pré-misturada unidimensional, no regime de escoamento laminar e permanente. A combustão do material ocorre na fase gasosa, portanto ocorre sublimação na superfície do sólido e, a certa distância, a chama é formada.

De acordo com o gradiente de temperatura, diferentes espécies químicas e concentrações podem ser encontradas, conforme se aumenta a distância da superfície sólida. Isto de acordo com o mecanismo da degradação do material estudado.

Pela aplicação de reações elementares que constituem o mecanismo de decomposição térmica da ADN e, também, de alguns parâmetros operacionais do sistema, como temperatura e pressão iniciais, foi possível a análise da combustão (chama) em relação à distância do material sólido.

Pode ser observado na Figura 1, que quanto maior a distância da superfície do material sólido menor é a fração molar do nitrogênio (reagente) e maior as frações molares de produtos e intermediários da decomposição térmica do ADN.

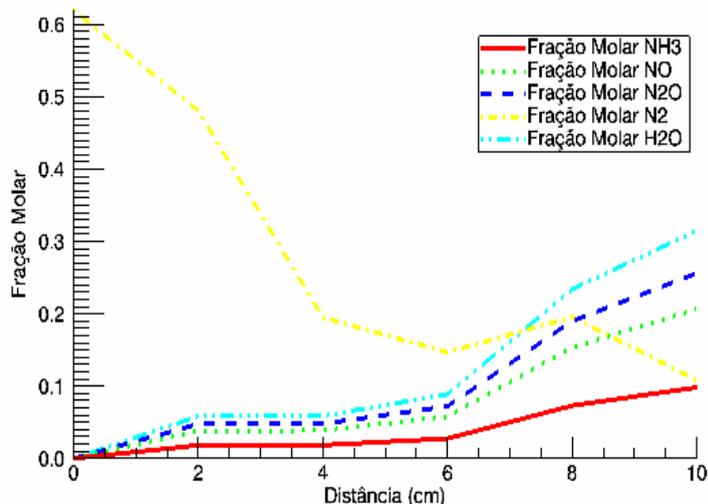


Figura 1: Variação das frações molares de componentes formados na combustão da ADN.

Conclusões

A partir de reações elementares, presentes no mecanismo de decomposição da ADN, foi possível a análise do comportamento das substâncias intermediárias, produtos da reação, além da variação de parâmetros termoquímicos com a distância em relação à superfície sólida do material.

Agradecimentos

CNPq – Conselho Nacional de Pesquisas e Desenvolvimento

¹ Meyer, R.; Köhler, J. e Homburg, A. *Explosives* **2002**, e. 5, 15.

² Vashishta, P.; Kalia, R. K. e Nakano, A. *J. Phys. Chem. B* **2006**, *110*, 3727.