Simulação da Combustão do Perclorato de Amônio e Polibutadieno Líquido Hidroxilado

Rene F. B. Gonçalves (PG)*, Francisco B. C. Machado (PQ), Koshun Iha (PQ), José A. F. F. Rocco (PQ)

**rene@ita.br*

ITA – Instituto Tecnológico de Aeronáutica – Departamento de Química – Praça Mal. Eduardo Gomes, 50 – Vila das Acácias – São José dos Campos – S.P. – CEP 12228-901

Palavras Chave: *Perclorato de amônio-AP, Polibutadieno Líquido Hidroxilado-PBLH, Chemkin e combustão.*

Introdução

Nos propelentes do tipo compósitos, a distribuição de massa dos constituintes inclui 20-40% de combustível metálico, normalmente o alumínio, 50-70% de oxidante e 10-20% de *binder*, principal fonte de carbono, que age como ligante[1].

O objetivo do presente trabalho é a simulação da combustão do perclorato de amônio (AP) e do AP formulado com polibutadieno líquido hidroxilado (HTPB), um binder comumente utilizado em propelentes sólidos, mediante simulação computacional pela utilização do *software Chemkin*.

Resultados e Discussão

O estudo da combustão foi realizado em duas etapas; primeiramente estudou-se o comportamento de queima do AP como material puro e subseqüentemente estudou-se o comportamento do AP formulado (AP/PBLH), ou seja, incorporado a uma matriz polimérica na forma de um grão propelente sólido compósito.

O estudo foi realizado utilizando-se o *software Chemkin,* o qual possui em sua estrutura diversos modelos de reatores que englobam todos os fatores cinéticos e termodinâmicos, além de fatores de fenômenos de transporte.

Primeiramente, foi selecionado um perfil de temperatura para a combustão dos materiais condensados em um reator homogêneo (módulo *Premix*), ou seja, onde as moléculas estão dispersas uniformemente em todo o sistema sólido, e a combustão é analisada a partir da superfície do material.

Os mecanismos de combustão do AP (22 reações elementares) e do AP/PBLH (76 reações elementares) foram inseridos separadamente no software, juntamente com os parâmetros de Arrhenius de todas as reações elementares presentes.

Em ambos os casos, a pressão interna da câmara foi variada de 1 a 60 atmosferas, que é a encontrada na câmara de combustão de um motor-foguete a propelente sólido convencional.

Os dados obtidos foram compilados e a estrutura da chama pode ser descrita sob a forma de frações molares dos produtos de combustão e evolução da temperatura a partir da superfície de queima do material.

A combustão do AP puro demonstrou significativas variações conforme modificação da pressão interna da câmara de combustão, verificando o efeito da pressão em termos de velocidade química, aumentando de forma acelerada a formação/decomposição de espécies químicas conforme o aumento da pressão, além da aproximação da frente de chama da superfície do material, também conforme aumento da pressão.

Para o caso do AP formulado com PBLH (Figura 1), seu comportamento em termos de fração molar mostrou-se invariante, devido às interações intermoleculares presentes no compósito, ou seja, devido à presença de um polímero homogeneamente disperso ao redor de todas as moléculas de perclorato de amônio.

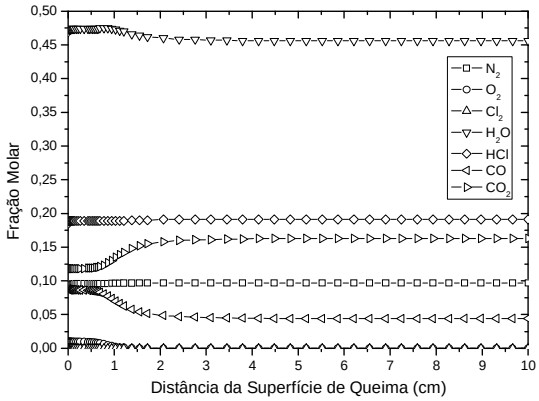

Figura 1: Evolução das frações molares dos produtos de queima do AP/HTPB nas condições da câmara de combustão na pressão 60 atm.

Conclusões

Quando comparado com dados experimentais, os resultados da simulação numérica confirmam o comportamento do material (propelente) em termos de concentrações de espécies químicas geradas no processo de combustão.

Agradecimentos

Ao Instituto Tecnológico de Aeronáutica e a CAPES, pelo apoio financeiro concedido.

[1] Vincent L. Pisacane – Fundamentals of Space Systems – 2ª Ed. – Oxford University Press – 2005 –pp. 206-212.