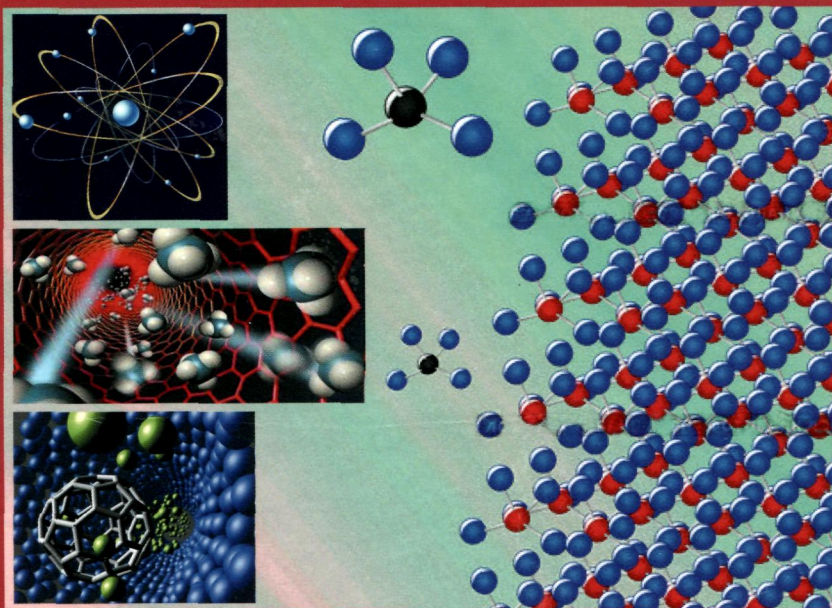


В. Н. Аликин, А. В. Вахрушев,
В. Б. Голубчиков,
А. М. Липанов, С. Ю. Серебренников

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ АЭРОЗОЛЬНЫХ НАНОТЕХНОЛОГИЙ

Топлива. Заряды. Двигатели.
Том III



«Машиностроение»
Москва – 2010 г.

ББК
П
УДК 539.3; 621.762; 519.6

НАУЧНОЕ ИЗДАНИЕ

Аликин Владимир Николаевич
Вахрушев Александр Васильевич
Голубчиков Валерий Борисович
Липанов Алексей Матвеевич
Серебренников Сергей Юрьевич

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ АЭРОЗОЛЬНЫХ НАНОТЕХНОЛОГИЙ ТОМ III. ТОПЛИВА. ЗАРЯДЫ. ДВИГАТЕЛИ.

В. Н. Аликин, А. В. Вахрушев, В. Б. Голубчиков, А. М. Липанов, С. Ю. Серебренников /
под редакцией академика РАН Липанова А. М. /
Разработка и исследование аэрозольных нанотехнологий
- Москва, 2010.-196 с.: ил.

Книга посвящена систематическому изложению теоретических основ и анализу практического применения аэрозольных нанотехнологий. Проведены фундаментально-прикладные исследования по синтезу и анализу высококонденсированных систем (ВКС) твердых топлив, при горении которых обеспечивается получение наноаэрозолей необходимого фракционного содержания по газовой и твердой фазам. Новизна предложенного подхода, в отличие от традиционных аэрозольных технологий различного распыления вещества, состоит в генерации в процессе горения ВКС активных, с высоким запасом энергии мельчайших частиц и газовой фазы требуемого состава, которые в комплексе обеспечивают получение новых положительных эффектов. Внедрение полученных результатов в экономику России проведено в виде комплексной технологии воздействий на растения, создания устройств для борьбы со взрывами и пожарами повышенной сложности, разработки систем по борьбе с авариями новых поколений.

Предназначена для инженеров, научных работников и аспирантов, занимающихся технической химией и разработкой методов получения, исследованием свойств и применением наночастиц и наноструктурных материалов. Полезна студентам вузов как учебное пособие.

Рецензент: д.х.н., профессор, заслуженный деятель науки РФ В. П. Бегичев

ISBN 978-5-94275-503-4

©, 2010

© В. Н. Аликин, А.В. Вахрушев, В. Б. Голубчиков, А. М.
Липанов, С. Ю. Серебренников
© «Машиностроение»

ОГЛАВЛЕНИЕ.....	3
ОТ РЕЦЕНЗЕНТА.....	5
ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ И ОБОЗНАЧЕНИЯ.....	7
ВВЕДЕНИЕ.....	9
ГЛАВА I. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ АЭРОЗОЛЬНЫХ НАНОТЕХНОЛОГИЙ.....	13
1.1. <i>Постановка задачи моделирования процессов формирования и эволюции наноаэрозолей.....</i>	<i>14</i>
1.2. Квантово-химические методы моделирования	17
1.3. Методы молекулярной динамики наносистем.....	19
1.3.1. Система уравнений метода молекулярной динамики.....	19
1.3.2. Граничные условия.....	21
1.3.3. Потенциалы взаимодействия атомов	26
1.4. Моделирование наносистем методами мезодинамики.....	31
1.4.1. Силовое взаимодействие наночастиц.....	33
1.4.2. Силы и моменты взаимодействия наночастиц	34
1.4.3. Уравнения мезодинамики для системы взаимодействующих наночастиц.....	35
1.4.4. Уравнения мезодинамики для системы невзаимодействующих наночастиц.....	37
1.4.5. Метод укрупнения расчетной ячейки.....	42
1.5. Общий алгоритм моделирования задач аэрозольных нанотехнологий.....	43
ГЛАВА II. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ФОРМИРОВАНИЯ И ЭВОЛЮЦИИ НАНОАЭРОЗОЛЕЙ.....	45
2.1. Численные алгоритмы решения квантово-химических задач наносистем	45
2.2. Численные схемы интегрирования по времени уравнений молекулярной динамики.....	51
2.3. Численные схемы интегрирования уравнений мезодинамики	62
2.4. Программный комплекс для моделирования наноаэрозольных систем.....	66
ГЛАВА III. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ И ЭВОЛЮЦИИ НАНОАЭРОЗОЛЕЙ	69
3.1. Экспериментальные исследования наночастиц, осажденных из газовой фазы.....	69
3.1.1. Методика эксперимента.....	69
3.1.2. Анализ формы и структуры микро - и наночастиц.....	70
3.2. Моделирование процессов формирования и движения наночастиц	74
3.2.1. Постановка задачи.....	74
3.2.2. Анализ молекулярного состава.....	75
3.2.3. Квантово-химические расчеты параметров основных молекул.....	76
3.2.4. Расчеты процессов образования наночастиц методом молекулярной динамики	77

ГЛАВА IV. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ОТРАБОТКА И ВНЕДРЕНИЕ АЭРОЗОЛЬНОЙ БИОТЕХНОЛОГИИ В РАСТЕНИЕВОДСТВЕ.....	85
4.1. Твердые топлива, пороха и технологии их производства.....	85
4.2. Обеспечение экологических параметров аэрозольных технологий.....	93
4.3. Внедрение разработанного подхода в практику сельхозпроизводства.....	97
4.3.1. Морфометрические исследования.....	101
4.3.2. Изучение активности фотосинтетического аппарата.....	105
4.3.3. Биохимический анализ ферментативной активности.....	107
4.3.4. Изучение внекорневой регуляции роста растений картофеля минеральным препаратом «Парник».....	109
4.3.5. Изучение действия минерального комплекса «Парник» на динамику роста и развития салатных культур.....	113
4.4. Практическое значение полученных результатов.....	117
ГЛАВА V. АЭРОЗОЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ БОРЬБЫ СО ВЗРЫВАМИ И ПОЖАРАМИ ПОВЫШЕННОЙ СЛОЖНОСТИ.....	118
5.1. Генераторы огнетушащего аэрозоля.....	118
5.1.1. Аэрозольные огнетушащие составы.....	118
5.1.2. Стационарные генераторы огнетушащего аэрозоля.....	132
5.1.3. Генераторы оперативного применения.....	146
5.2. Системы импульсного пожаротушения.....	148
5.3. Комбинированные аэрозольно-порошковые системы.....	157
ГЛАВА VI. ЗАРЯДЫ ТВЕРДОГО ТОПЛИВА ДЛЯ АВАРИЙНЫХ СИСТЕМ	166
6.1. Области применения устройств	166
6.2. Систематизация аварийных систем и пути их развития.....	169
6.3. Физические и математические модели функционирования аварийных систем.....	180
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	187
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	188