

ISSN 2410-6593 (Print), ISSN 2686-7575 (Online)

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-2-38-46>



УДК 544.31:[665.753.2+546.26]

## Многослойные углеродные нанотрубки – компонент энергоемких суспензионных реактивных горючих

**Л.С. Карпушенкова<sup>@</sup>, Г.Я. Кабо, А.В. Блохин**

Белорусский государственный университет, Минск, 220030 Республика Беларусь

<sup>@</sup>Автор для переписки, e-mail: [karpushenkava@bsu.by](mailto:karpushenkava@bsu.by)

**Цели.** Добавление высокоплотных углеродных материалов в реактивные топлива может привести к значительному увеличению его объемной энергоемкости. Цель работы заключалась в проведении термодинамического анализа возможности получения модельных углеводородных топлив из толуола и Т-1 с многослойными углеродными нанотрубками (МУНТ).

**Методы.** Свойства МУНТ были исследованы при помощи следующих методов: энергия сгорания в кристаллическом состоянии определена методом бомбовой калориметрии, температурная зависимость теплоемкости в интервале 5–370 К – методом адиабатической калориметрии, физическая плотность – пикнометрическим методом, седиментационная устойчивость смесей с жидкостями – центрифугированием при 7000 г. Расчеты проводились в программе MS Excel.

**Результаты.** Определены энергия и энтальпия сгорания технического образца МУНТ в кристаллическом состоянии. На основании сглаженных значений теплоемкости получены стандартные термодинамические функции (энтальпия, энтропия и приведенная энергия Гиббса) МУНТ в кристаллическом состоянии в интервале 0–2000 К. Экстраполяция теплоемкости МУНТ до температуры 2000 К проведена с использованием теплоемкости кристаллического графита. Установлено, что смеси МУНТ с жидкостями, содержащими МУНТ более 33 масс. %, седиментационно устойчивы в центрифуге при 7000 г. Для модельных систем толуол–МУНТ, горючее Т-1–МУНТ вычислены массовые и объемные энергии сгорания, адиабатические температуры горения, условная конечная максимальная скорость модельных ракет с горючим различных составов.

**Выводы.** Термодинамический анализ показал, что добавление МУНТ существенно повышает объемную энергоемкость традиционных реактивных топлив, что должно приводить к улучшению эксплуатационных характеристик летательных аппаратов.

**Ключевые слова:** модельное углеводородное топливо, энергоемкость, многослойные углеродные нанотрубки, массовая теплота сгорания, объемная теплота сгорания, адиабатическая температура горения, удельный импульс, условная конечная максимальная скорость, промышленное внедрение

**Для цитирования:** Карпушенкова Л.С., Кабо Г.Я., Блохин А.В. Многослойные углеродные нанотрубки – компонент энергоемких суспензионных реактивных горючих. *Тонкие химические технологии.* 2020;15(2):38-46. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-2-38-46>

# Stacked-cup multiwall carbon nanotubes as components of energy-intensive suspension jet fuels

Larisa S. Karpushenkava<sup>@</sup>, Gennadii Ya. Kabo, Andrey V. Blokhin

Belarusian state University, Minsk, 220030 Republic of Belarus

<sup>@</sup>Corresponding author, e-mail: karpushenkava@bsu.by

**Objectives.** The addition of high-density carbon materials to jet fuels can lead to a significant increase in the volumetric energy of the fuel combustion. The purpose of the current study was to thermodynamically analyze the possibility of obtaining model hydrocarbon fuels from toluene and T-1 using stacked-cup multiwall carbon nanotubes (MWCNTs).

**Methods.** Bomb combustion calorimetry was used to define the combustion energy of the MWCNTs in the crystalline state. The temperature dependence of the MWCNTs' heat capacity in the range 5–370 K and the fusion parameters were estimated using low-temperature adiabatic calorimetry. The physical density of MWCNTs was measured using the pycnometric method. The sedimentation stability of the mixtures of MWCNTs with liquids was determined using centrifugation at 7000 g. The calculations were carried out in MS Excel.

**Results.** The energy and enthalpy of combustion of a technical sample of MWCNTs in the crystalline state were determined. Based on the smoothed heat capacity values, the standard thermodynamic functions (enthalpy, entropy, and Gibbs reduced energy) of MWCNTs in the crystalline state were obtained in a temperature range of 0–2000 K. The extrapolation of the MWCNTs' heat capacity was carried out at a temperature of up to 2000 K using the heat capacity of crystalline graphite. It has been established that mixtures of MWCNTs with liquids containing more than 33 mass % of MWCNTs are stable during centrifugal sedimentation at 7000 g. For the toluene–MWCNTs and fuel T-1–MWCNTs model systems, the specific and volumetric combustion energies, the adiabatic combustion temperatures, and the conditional final maximum speed of the model rockets with fuel of various compositions were also calculated.

**Conclusions.** The thermodynamic analysis showed that the addition of MWCNTs can significantly increase the volumetric energy intensity of traditional jet fuels, which can in turn improve the operational characteristics of drones and rockets.

**Keywords:** model hydrocarbon fuel, energy intensity, cup multiwall carbon nanotubes, specific energy of combustion, volumetric energy of combustion, adiabatic combustion temperature, specific impulse, conditional final maximum speed, industrial implementation.

**For citation:** Karpushenkava L.S., Kabo G.Ya., Blokhin A.V. Stacked-cup multiwall carbon nanotubes as components of energy-intensive suspension jet fuels. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2020;15(2):38-46 (in Russ.). <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2020-15-2-38-46>

## ВВЕДЕНИЕ

Разработка энергоемких химических горючих для беспилотных летательных аппаратов и различных реактивных двигателей, несомненно, актуальная задача. Использование углеродных материалов – технического углерода, фуллерита C<sub>60</sub> в качестве компонентов энергоемких жидких (пастообразных) и твердых (реактивных) топлив оправдано вследствие их высокой физической плотности, высокой энергии сгорания и образования неконденсирующегося продукта (CO<sub>2</sub>) при горении [1].

В настоящей работе представлены результаты исследования термодинамических свойств и плотности технического образца многослойных углеродных нанотрубок (МУНТ, *Vision Development*, Япония), некоторые физико-химические и структурные параметры которых приведены в табл. 1.

Таблица 1. Физико-химические параметры МУНТ, заявленные поставщиком

Table 1. Physicochemical parameters of MWCNTs as provided by the supplier

Параметр Parameter	Значение Value
Физическое состояние Physical state	Черный порошок Black powder
Средняя длина, м Average length, m	$\leq (1-2) \times 10^{-6}$
Средний внутренний диаметр, м Average inner diameter, m	$\sim 50 \times 10^{-9}$
Внешний диаметр, м Outer diameter, m	$(10-80) \times 10^{-9}$
Термическая стабильность, К Thermal stability, K	<973

В работах [2, 3] показано, что плотность и энергия сгорания МУНТ в пересчете на 100% содержания углерода очень мало отличаются от соответствующих параметров кристаллического графита (табл. 2). Физическая плотность МУНТ заметно выше плотности технического углерода и фуллерита  $C_{60}$  (на 16 и 32%, соответственно), что позволяет считать их перспективным компонентом для получения энергоемких горючих в смесях с углеводородами. Фуллерит  $C_{60}$  имеет более высокую (~ на 10%) массовую энергию сгорания [4, 5] по сравнению с графитом и МУНТ, но и существенно меньшую (~ на 30%) физическую плотность по сравнению с графитом. Фуллерит  $C_{60}$  ограниченно растворим в углеводородах (внутренняя полость молекул  $C_{60}$  не заполняется в жидкостях), и поэтому перспективы его использования в качестве компонентов жидких топлив сомнительны.

Ранее нами было установлено [7], что низкомолекулярные жидкости заполняют внутреннюю полость МУНТ, а энтальпия сорбции жидких компонентов (ионных жидкостей) очень мала. В настоящей работе приведены оценки энергоэффективности модельных горючих толуол–МУНТ, Т-1–МУНТ.

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Плотность МУНТ измерена в стеклянном пикнометре объемом  $(0.8876 \pm 0.0009) \text{ см}^3$  с использованием бидистиллированной воды  $\rho = 998.3 \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$  (292 К) [3] и свежеперегнанного толуола  $\rho = 867.8 \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$  [2] в качестве пикнометрических жидкостей. Пикнометр, заполненный нанотрубками и пикнометрической жидкостью, нагревался в кипящей воде и, после охлаждения до ~293 К без контакта с воздухом, доводился пикнометрической жидкостью до метки и взвешивался. Средняя физическая плотность МУНТ составила  $(2210 \pm 22) \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$  [2], что практически соответствует плотности гексагонального графита  $2265 \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$  [6]. Насыпная плотность МУНТ ~400  $\text{кг}\cdot\text{м}^{-3}$  [2].

Энтальпия сгорания технического образца МУНТ определена в автоматизированном калориметре сгорания [8] с калориметрической бомбой объемом  $326 \text{ см}^3$  и энергетическим эквивалентом  $(14605 \pm 3) \text{ Дж}\cdot\text{К}^{-1}$ . Образцы МУНТ высушены при 130 и 200 °С под вакуумом ( $P \approx 100 \text{ Па}$ ). По результатам сжигания в калориметрической бомбе оценено содержание золы в МУНТ  $(0.88 \pm 0.07)\%$ , что соответствует 0.69% металлического никеля, используемого в качестве катализатора синтеза. Показано, что металлический никель невозможно удалить из МУНТ ни магнитной сепарацией, ни растворением в азотной кислоте в течение 24 часов. По результатам сжигания высушенных под вакуумом технических образцов МУНТ в полиэтиленовых пакетах с хлопковой нитью для поджига определена средняя энергия сгорания:  $\Delta_c U^\circ(298.15 \text{ К}) = -(32336 \pm 13) \text{ кДж}\cdot\text{кг}^{-1}$  [2].

Теплоемкость технического образца МУНТ в интервале 5–370 К измерена в адиабатическом калориметре ТАУ-10 [8]. В [2, 3] показано, что теплоемкость МУНТ, графита и фуллеритов  $C_{60}$ ,  $C_{70}$  в интервале 300–350 К различаются не более, чем на 3%. Экстраполяция теплоемкости  $C_p$  технического образца МУНТ<sub>техн.</sub> от 400 до 2000 К проведена по уравнению:

$$C_p(\text{МУНТ}_{\text{техн.}}, T(\text{К})) = 0.9931C_p(\text{графит}, T(\text{К})) + 0.0069C_p(\text{Ni(кр.)}) \times T(\text{К}), \quad (1)$$

Термодинамические свойства технического образца МУНТ в интервале 0–2000 К представлены в табл. 3.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

### Физико-химические свойства смесей МУНТ + жидкость

При детальном исследовании взаимодействия ионных и не ионных жидкостей с МУНТ [7] было установлено, что:

Таблица 2. Энергии сгорания  $-\Delta_c U^\circ(298.15 \text{ К})$  и плотности  $\rho$  кристаллического графита, МУНТ и фуллерита  $C_{60}$   
 Table 2. Combustion energy  $-\Delta_c U^\circ(298.15 \text{ К})$  and density  $\rho$  of crystalline graphite, MWCNTs, and fullerite  $C_{60}$

Свойство Property	Графит кристаллический Crystalline graphite	МУНТ MWCNTs	$C_{60}$
$-\Delta_c U^\circ(298.15 \text{ К}), \text{ кДж}\cdot\text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c U^\circ(298.15 \text{ К}), \text{ кДж}\cdot\text{кг}^{-1}$	$32764 \pm 4^1$	$32336 \pm 13$ [2]	$35802$ [4]
$\rho(298.15 \text{ К}), \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$ $\rho(298.15 \text{ К}), \text{ кг}\cdot\text{м}^{-3}$	$2265$ [6]	$2210 \pm 22$ [2]	$1720$ [4]

<sup>1</sup> NIST Chemistry Webbook, SRD 69. URL: [webbook.nist.gov/chemistry/](http://webbook.nist.gov/chemistry/) [Дата обращения 15.03.2019]. <https://doi.org/10.18434/T4D303> [NIST Chemistry Webbook, SRD 69. Available from: [webbook.nist.gov/chemistry/](http://webbook.nist.gov/chemistry/) [Accessed March 15, 2019] <https://doi.org/10.18434/T4D303>].

1. Неионные жидкости – толуол и вода проникают во внутреннюю полость МУНТ при смешении при 293 К и Р ~ 1 бар.

2. Ионные жидкости (ИЖ) при атмосферном давлении во внутреннюю полость ионной жидкости не проникают, при вакуумировании полностью проникают внутрь МУНТ, что позволяет определить объем полости.

3. Энтальпия смешения МУНТ с ИЖ (1-бутил-3-метилимидазолий гексафторфосфат и др.) не превышает чувствительности калориметра смешения [7, 8].

4. Седиментационная устойчивость систем МУНТ–ИЖ при центрифугировании с ускорением 7000 g зависит от соотношения компонентов. При массовом содержании в смеси МУНТ ≥ 0.33 расслоения систем не наблюдалось, т.е. можно считать, что

системы, содержащие количества МУНТ, превышающие насыпную плотность, седиментационно устойчивы.

В результате компьютерного моделирования [9] установлено, что плотность упаковки (φ) различных по геометрии фигур мало зависит от их конфигурации и составляет в среднем 0.58. При таком значении возможно предположить образование композиций Т-1–МУНТ и толуол–МУНТ с массовой долей до ω = 0.75.

### Некоторые технические характеристики суспензионных горючих типа C<sub>n</sub>H<sub>m</sub>–МУНТ

Физико-химические и термодинамические свойства таких топлив можно вычислить на основании простой аддитивности для соответствующих составов (табл. 4–6).

**Таблица 3.** Термодинамические свойства (стандартные теплоемкость, энтропия, энтальпия и приведенная энергия Гиббса) МУНТ (99.31 масс. % С, 0.69 масс. % Ni)

**Table 3.** Thermodynamic functions (standard heat capacities, entropies, enthalpies and Gibbs reduced energy) of MWCNTs (99.31 mass % C, 0.69 mass % Ni)

T*, К	C <sub>p</sub> <sup>o</sup> , Дж·кг <sup>-1</sup> ·К <sup>-1</sup>	Δ <sub>0</sub> <sup>T</sup> S <sup>o</sup> , Дж·кг <sup>-1</sup> ·К <sup>-1</sup>	Δ <sub>0</sub> <sup>T</sup> H <sup>o</sup> , кДж·кг <sup>-1</sup>	Φ <sup>o</sup> , Дж·кг <sup>-1</sup> ·К <sup>-1</sup>
	C <sub>p</sub> <sup>o</sup> , J·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>	Δ <sub>0</sub> <sup>T</sup> S <sup>o</sup> , J·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>	Δ <sub>0</sub> <sup>T</sup> H <sup>o</sup> , kJ·kg <sup>-1</sup>	Φ <sup>o</sup> , J·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup>
0	0	0	0	0
50	51.91	28.62	0.9388	9.846
100	158.5	95.64	6.082	34.82
150	290.2	184.0	17.20	69.32
200	437.8	287.5	35.36	110.7
250	591.6	401.7	61.10	157.3
298.15	733.7	518.1	93.04	206.1
300	739.0	522.7	94.40	208.0
370	932.0	697.5	153.0	284.0
400*	932.0	697.5	153.0	284.0
500	1261	1027	296.3	434.3
600	1453	1274	432.3	553.9
700	1598	1510	585.1	673.8
800	1710	1731	750.6	792.4
900	1796	1937	926.0	908.3
1000	1864	2130	1109	1021
1100	1921	2311	1298	1130
1200	1961	2480	1492	1236
1300	2009	2639	1691	1338
1400	2051	2789	1894	1436
1500	2092	2932	2101	1531
1600	2113	3068	2311	1623
1700	2134	3197	2524	1712
1800	2900	3340	2775	1798
1900	3004	3499	3070	1883
2000	2175	3633	3329	1968

\*Значения термодинамических свойств МУНТ при 400–2000 К экстраполированы по уравнению (1).

\*The thermodynamic properties of MWCNTs at 400–2000 K were extrapolated according to equation (1).

Таблица 4. Физико-химические свойства компонентов топлив  
Table 4. Physicochemical properties of the fuel components

Компонент Component	Состав Composition	$M, \text{г} \cdot \text{моль}^{-1}$ $M, \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$	$\rho, \text{кг} \cdot \text{м}^{-3}$ $\rho, \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	$-\Delta_c H^\circ(298.15)^*, \text{кДж} \cdot \text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c H^\circ(298.15)^*, \text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	$-\Delta_c H^\circ(298.15)^*, \text{МДж} \cdot \text{м}^{-3}$ $-\Delta_c H^\circ(298.15)^*, \text{MJ} \cdot \text{m}^{-3}$
МУНТ [2] MWCNTs [2]	CNi <sub>0.0014</sub>	12.094	2210	32336	71463
Толуол [1] Toluene [1]	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	92.141	867.1	40963	35519
Горючее Т-1 [1] Combustible Т-1 [1]	C <sub>12.8</sub> H <sub>24.12</sub>	178.05	800	42900	34320
Углерод технический [1] Carbon black [1]	C	12.011	1900	32781	62284

\*Низшая теплота сгорания.

\*Net calorific value.

Таблица 5. Низшие энтальпии сгорания смесей толуол–МУНТ в стехиометрических количествах кислорода и воздуха при 298.15 К и  $P = 1$  бар  
Table 5. Lower enthalpies of combustion for the toluene–MWCNTs mixtures in stoichiometric quantities of oxygen and air at 298.15 K and  $P = 1$  bar

$\omega(\text{МУНТ}),$ масс. доля $\omega(\text{MWCNTs}),$ mass fract.	Энтальпия сгорания горючего Combustible combustion enthalpy		Энтальпия сгорания топлива Fuel combustion enthalpy		
			с кислородом with oxygen		с воздухом with air
	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{дм}^{-3}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{dm}^{-3}$	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	$\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{дм}^{-3}$ $\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{dm}^{-3}$	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
0	40.96	35.52	9.929	10.52	2.825
0.10	40.10	37.02	9.834	10.60	2.805
0.20	39.24	38.73	9.737	10.69	2.785
0.30	38.37	40.69	9.637	10.78	2.764
0.40	37.51	42.97	9.535	10.88	2.743
0.50	36.65	45.65	9.430	10.99	2.721
0.75	34.49	54.95	9.156	11.29	2.663

\*При расчете плотности топлива принято для плотности жидкого кислорода значение  $\rho(\text{O}_2) = 1140 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$  [1].

\*When calculating the fuel density, the liquid oxygen density was considered to be  $\rho(\text{O}_2) = 1140 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  [1].

Таблица 6. Низшие энтальпии сгорания смесей Т-1 с МУНТ в стехиометрических количествах кислорода и воздуха при 298.15 К и  $P = 1$  бар  
Table 6. Lower enthalpies of combustion for the Т-1–MWCNTs mixtures in stoichiometric quantities of oxygen and air at 298.15 K and  $P = 1$  bar

$\omega(\text{МУНТ}),$ масс. доля $\omega(\text{MWCNTs}),$ mass fract.	Энтальпия сгорания горючего Combustible combustion enthalpy		Энтальпия сгорания топлива Fuel combustion enthalpy		
			с кислородом with oxygen		с воздухом with air
	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{дм}^{-3}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{dm}^{-3}$	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$	$\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{дм}^{-3}$ $\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{dm}^{-3}$	$-\Delta_c H^\circ, \text{МДж} \cdot \text{кг}^{-1}$ $-\Delta_c H^\circ, \text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
0	42.90	34.32	9.786	10.17	2.747
10	41.84	35.76	9.708	10.27	2.735
20	40.79	37.40	9.627	10.38	2.722
30	39.73	39.31	9.544	10.50	2.710
40	38.67	41.54	9.457	10.62	2.696
50	37.62	44.19	9.367	10.76	2.682
75	34.98	53.66	9.128	11.15	2.643

\*При расчете плотности топлива принято для плотности жидкого кислорода значение  $\rho(\text{O}_2) = 1140 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$  [1].

\*When calculating the fuel density, the liquid oxygen density was considered to be  $\rho(\text{O}_2) = 1140 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  [1].

Расчет плотности смесей жидких горючих и МУНТ не подчиняется правилам аддитивности, поэтому плотность определялась как отношение массы смеси к сумме объемов входящих в смесь компонентов с учетом состава.

Условные адиабатические температуры горения  $T_{ад}$  определены с использованием теплоемкостей газообразных  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$ ,  $Ar^{2,3}$ , на основании соотношения (2):

$$-\Delta_c H_{298.15} = \int_{298.15}^{T_{ад}} a_i C_{p,i} dT, \quad (2)$$

где  $\Delta H_{298.15}$  – низшая теплота сгорания горючего на воздухе,  $a_i$  – мольные доли компонентов дымовых газов в смеси,  $C_{p,i}$  – теплоемкость компонентов, Дж·моль<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup>. В состав топливных газов входили  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$  и  $Ar$ , при условии отсутствия диссоциации и конверсии продуктов горения. Состав компонентов воздуха заимствован из межгосударственного стандарта<sup>4</sup>, а результаты расчетов приведены в табл. 7.

Для оценки эффективности топлив с МУНТ рассчитаны конечная скорость истечения газов (условный удельный импульс (м·с<sup>-1</sup>)) [10, 11] на основании соотношения (3):

**Таблица 7.** Физико-химические характеристики горючих суспензий Толуол\*–МУНТ и Т-1\*\*–МУНТ  
**Table 7.** Physicochemical characteristics of the combustible suspensions' toluene\*–MWCNTs and T-1\*\*–MWCNTs

Свойство Property	Массовая доля $\omega$ (МУНТ) в горючем Mass fraction $\omega$ (MWCNTs) in fuel					
	0	0.20	0.30	0.40	0.50	0.75
<b>толуол*–МУНТ toluene*–MWCNTs</b>						
$\rho$ , кг·м <sup>-3</sup> $\rho$ , kg·m <sup>-3</sup>	867.1	987.1	1060	1146	1246	1593
$T_{ад}$ , К (в $O_2$ ) $T_{ад}$ , К (in $O_2$ )	6227	6302	6343	6387	6433	6565
$T_{ад}$ , К (в воздухе) $T_{ад}$ , К (in the air)	2507	2496	2491	2486	2480	2465
$I_{уд}$ , м·с <sup>-1</sup> $I_{спец}$ , м·с <sup>-1</sup>	2004	1990	1983	1975	1967	1946
$P_{уд}$ , с $P_{спец}$ , s	204.4	202.9	202.2	201.4	200.6	198.4
$V_{max}$ , м·с <sup>-1</sup> $V_{max}$ , m·s <sup>-1</sup>	4615	4816	4928	5049	5181	5574
<b>Т-1**–МУНТ T-1**–MWCNTs</b>						
$\rho$ , кг·м <sup>-3</sup> $\rho$ , kg·m <sup>-3</sup>	800	917	989	1074	1175	1534
$T_{ад}$ , К (в $O_2$ ) $T_{ад}$ , К (in $O_2$ )	5738	5870	5944	6025	6114	6378
$T_{ад}$ , К (в воздухе) $T_{ад}$ , К (in the air)	2408	2413	2417	2421	2425	2436
$I_{уд}$ , м·с <sup>-1</sup> $I_{спец}$ , м·с <sup>-1</sup>	1977	1969	1984	1959	1954	1940
$P_{уд}$ , с $P_{спец}$ , s	201.6	200.7	202.3	199.7	199.2	197.8
$V_{max}$ , м·с <sup>-1</sup> $V_{max}$ , m·s <sup>-1</sup>	4553	4776	4950	5037	5186	5634

\*толуол:  $C_7H_8$ ;  $M = 92.1$  г·моль<sup>-1</sup>;  $C_{298.15}^\circ = 1693$  Дж·кг<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup> [1].

\*toluene:  $C_7H_8$ ;  $M = 92.1$  g·mol<sup>-1</sup>;  $C_{298.15}^\circ = 1693$  J·kg<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> [1].

\*\*горючее Т-1:  $C_{12.8}H_{24.12}$ ;  $M = 178.1$  г·моль<sup>-1</sup>;  $C_{298.15}^\circ = 1921$  Дж·кг<sup>-1</sup>·К<sup>-1</sup> [1].

\*\*combustible T-1:  $C_{12.8}H_{24.12}$ ;  $M = 178.1$  g·mol<sup>-1</sup>;  $C_{298.15}^\circ = 1921$  J·kg<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> [1].

<sup>2</sup> NIST Chemistry Webbook, SRD 69. Available from: webbook.nist.gov/chemistry/ [Accessed 18.03.2019] https://doi.org/10.18434/T4D303

<sup>3</sup> База данных ИВТАНТЕРМО. URL: http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/ (дата обращения 18.03.2019) [IVTANTERMO Database. Available from: http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/ [Accessed 18.03.2019] (in Russ.).]

<sup>4</sup> ГОСТ 4401-81. Атмосфера стандартная. Параметры. Москва: Изд-во стандартов, 1981. 179 с. [GOST 4401-81. Standard atmosphere. Parameters. Moscow: Publishing House of Standards; 1981. 179 p. (in Russ.).]

$$I_{y0} = W = \sqrt{2(-\Delta_c H)n_t}, \text{ м} \cdot \text{с}^{-1}, \quad (3)$$

где  $\Delta_c H$  – низшая энтальпия сгорания топлива со стехиометрическим количеством окислителя (Дж·кг<sup>-1</sup>),  $n_t$  – термический эффективный к.п.д. ракетного двигателя, определяемый по соотношению (4):

$$n_t = 1 - \left(\frac{P_0}{P}\right)^{\frac{k-1}{k}}, \quad (4)$$

где  $P, P_0$  – давления в камере сгорания и на срезе сопла (принято, что  $P_0/P \approx 0.01$ );  $k$  – показатель адиабаты, зависящий от молекулярных масс продуктов сгорания ( $k = C_p/C_v$ ), при условии  $k(T) = \text{const}$ . Для смесей продуктов сгорания теплоемкость рассчитывалась как  $C_p = \sum a_i C_{p,i}$ , где  $a_i$  – мольная доля компонента в смеси,  $C_{p,i}$  – теплоемкость компонента. Тогда в приближении идеального газа  $C_v = C_p - R$ .

Удельная тяга рассчитана по выражению (5):

$$P_{уд} = \frac{I_{уд}}{g}, \text{ с}, \quad (5)$$

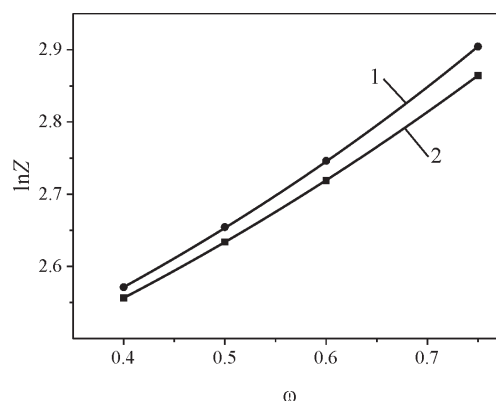
где  $g$  – ускорение свободного падения.

Условная конечная (максимальная) скорость летательного аппарата (м·с<sup>-1</sup>) в момент завершения горения без учета силы тяжести и аэродинамического сопротивления рассчитана по соотношению Циолковского (6):

$$V_{\max} = I_{уд} \ln Z, \quad (6)$$

где  $Z = 1 + \frac{m_{\text{топл}}}{m_{\text{констр}}}$ ;  $m_{\text{топл}}$  – масса топлива (кг);  $m_{\text{констр}}$  – масса конструкции без топлива.

Параметр  $\ln Z$  определен для модельной ракеты массой  $(m_{\text{топл}} + m_{\text{констр}}) = 1000$  кг без МУНТ ( $\omega = 0$ ) и массой конструкции  $m_{\text{констр}} = 100$  кг = const. Для такой модели объем топливного бака ( $V_T$ ) равен



Зависимость параметра  $\ln Z$  от массовой доли нанотрубок: 1) для смеси Т-1–МУНТ, 2) для смеси толуол–МУНТ.

Dependence of the parameter  $\ln Z$  on the mass fraction of nanotubes:

- 1) for the mixture T-1-MWCNTs,
- 2) for the mixture toluene-MWCNTs.

$900/\rho_{\text{топл}}$ . Для толуола  $V_T' = 1.0379$  м<sup>3</sup>, для топлива Т-1  $V_T'' = 1.125$  м<sup>3</sup>. Зависимость параметра  $\ln Z$  от массовой доли нанотрубок представлена на рисунке.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Расчеты показывают, что для топлив с МУНТ условная максимальная скорость модельной системы возрастает на 24–26% при  $\omega = 0.75$ , что должно приводить к соответствующему увеличению дальности полета летательного аппарата. Естественно, вывод о практическом применении энергоемких горючих с нанотрубками требует исследования и других технически важных свойств: вязкости, скорости горения и т.п. Однако сообщение [12] о том, что катализаторы на основе углеродных нанотрубок с наночастицами металлов и оксидов обладают способностью регулировать скорость горения, повышает потенциал использования углеродных нанотрубок в качестве компонентов энергоемких топлив и вызывает интерес к такому рода системам.

*Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.*

*The authors declare no conflicts of interest.*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сорокин В.А., Францевич В.П., Яновский Л.С., Бакулин В.Н., Дубовкин Н.Ф., Котова В.Н. Энергоемкие горючие для авиационных и ракетных двигателей. М.: Физматлит, 2009. 400 с. ISBN 978-5-9221-1091-4
2. Kabo G.J., Paulechka E., Blokhin A.V., Voitkevich O.V., Liavitskaya T., Kabo A.G. Thermodynamic Properties and Similarity of Stacked-Cup Multiwall Carbon Nanotubes and Graphite. *J. Chem. Eng. Data.* 2016;61(11):3849-3857. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.6b00525>

## REFERENCES

1. Sorokin V.A., Frantskevich V.P., Yanovskii L.S., Bakulin V.N., Dubovkin N.F., Kotova V.N. *Energoemkie goryuchie dlya aviatsionnykh i raketnykh dvigatelei* (Energy-intensive fuels for aircraft and rocket engines). Moscow: Fizmatlit; 2009. 400 p. (in Russ.). ISBN 978-5-9221-1091-4
2. Kabo G.J., Paulechka E., Blokhin A.V., Voitkevich O.V., Liavitskaya T., Kabo A.G. Thermodynamic Properties and Similarity of Stacked-Cup Multiwall Carbon Nanotubes and Graphite. *J. Chem. Eng. Data.* 2016;61(11):3849-3857. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.6b00525>

3. Кабо Г.Я., Блохин А.В., Павлечко Е.В., Войткевич О.В., Левицкая Т.Н. Термодинамическое подобие многослойных конических нанотрубок и графита. *Свиридовские чтения*: сб. ст. Вып. 11. Минск: БГУ, 2015. С. 60-67. URL: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/223236>
4. Сидоров Л.Н., Юровская М.А., Борщевский А.Я., Трушков И.В., Иоффе И.Н. Фуллерены: Учебное пособие. М.: Экзамен; 2005. 688 с. ISBN 5-472-00294-X
5. Diky V.V., Kabo G.J. Thermodynamic properties of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> fullerene. *Russ. Chem. Rev.* 2000;69(2):95-104. <https://doi.org/10.1070/RC2000v069n02ABEH000535>
6. Howe J.Y., Rawn C.J., Jones L.E. Ow H. Improved crystallographic data for graphite. *Powder Diffr.* 2003;18(2):150-154. <https://doi.org/10.1154/1.1536926>
7. Shevelyova M.P., Paulechka Y.U., Kabo G.J. Blokhin A.V., Kabo A.G., Gubarevich T.M. Physicochemical Properties of Imidazolium-based Ionic Nanofluids: Density, Heat Capacity, and Enthalpy of Formation. *J. Phys. Chem. C.* 2013;117(9):4782-4790. <https://doi.org/10.1021/jp3059432>
8. Kabo G.J., Blokhin A.V., Paulechka E. Roganov G.N., Frenkel M., Yursha I.A., Diky V., Zaitsau D., Bazyleva A., Simirsky V.V., Karpushenkava L.S., Sevruk V.M. Thermodynamic properties of organic substances: Experiment, modeling, and technological applications. *J. Chem. Thermodyn.* 2019;131:225-246. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2018.10.025>
9. Мизгулин В.В., Кадушников Р.М., Алиевский Д.М., Алиевский В.М. Моделирование плотных материалов методом упаковки сферополлиэдров. *Компьютерные исследования и моделирование.* 2012;4(4):757-766. <https://doi.org/10.20537/2076-7633-2012-4-4-757-766>
10. Егорычев В.С., Кондрусев В.С. Топлива химических ракетных двигателей. Самара: Изд. СГАУ; 2007. 72 с. ISBN 978-5-7883-0512-7
11. Паушкин Я.М. Жидкие и твердые химические ракетные топлива. М.: Наука; 1978. 192 с.
12. Zhao F., Yi J., Hong W., An T. Yang Y. Preparation, Characterization, and Catalytic Activity of Carbon Nanotubes-Supported Metal or Metal Oxide. In: *Energetic Nanomaterials. Synthesis, Characterization and Application*, Ch. 10. Amsterdam: Elsevier; 2016. P. 231-284. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802710-3.00010-6>
3. Kabo G.J., Blokhin A.V., Paulechka Y.U., Boitkevich O.V., Levitskaya T.N. Thermodynamic similarity of stacked-cup multiwall carbon nanotubes and graphite. *Sviridovskie Chteniya = Sviridov Readings. Iss. 11.* Minsk: BSU Publing House; 2015. P. 60-67. (in Russ.). <http://elib.bsu.by/handle/123456789/223236>
4. Sidorov L.N., Yurovskaya M.A., Borshchevskii A.Ya., Trushkov I.V., Ioffe I.N. *Fullereny: Uchebnoe posobie* (Fullerenes: Study Guide). Moscow: Ekzamen; 2005. 688 p. (in Russ.). ISBN 5-472-00294-X
5. Diky V.V., Kabo G.J. Thermodynamic properties of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> fullerene. *Russ. Chem. Rev.* 2000;69(2):95-104. <https://doi.org/10.1070/RC2000v069n02ABEH000535>
6. Howe J.Y., Rawn C.J., Jones L.E. Ow H. Improved crystallographic data for graphite. *Powder Diffr.* 2003;18(2):150-154. <https://doi.org/10.1154/1.1536926>
7. Shevelyova M.P., Paulechka Y.U., Kabo G.J. Blokhin A.V., Kabo A.G., Gubarevich T.M. Physicochemical Properties of Imidazolium-based Ionic Nanofluids: Density, Heat Capacity, and Enthalpy of Formation. *J. Phys. Chem. C.* 2013;117(9):4782-4790. <https://doi.org/10.1021/jp3059432>
8. Kabo G.J., Blokhin A.V., Paulechka E. Roganov G.N., Frenkel M., Yursha I.A., Diky V., Zaitsau D., Bazyleva A., Simirsky V.V., Karpushenkava L.S., Sevruk V.M. Thermodynamic properties of organic substances: Experiment, modeling, and technological applications. *J. Chem. Thermodyn.* 2019;131:225-246. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2018.10.025>
9. Mizgulin V.V., Kadushnikov R.M., Alievsky D.M., Alievsky V.M. The modeling of dense materials with spherepolyhedra packing method. *Komp'yuternye issledovaniya i modelirovanie = Computer Research and Modeling.* 2012;4(4):757-766 (in Russ.). <https://doi.org/10.20537/2076-7633-2012-4-4-757-766>
10. Egoroychev V.S., Kondrusev V.S. *Topliva khimicheskikh raketnykh dvigatelei* (Fuel chemical rocket engines). Samara: Samara National Research University Publishing House; 2007. 72 p. (in Russ.). ISBN 978-5-7883-0512-7
11. Pausshkin Ya.M. *Zhidkie i tverdye khimicheskie raketnye topliva* (Liquid and solid chemical rocket fuels). Moscow: Nauka; 1978. 192 p. (in Russ.).
12. Zhao F., Yi J., Hong W., An T. Yang Y. Preparation, Characterization, and Catalytic Activity of Carbon Nanotubes-Supported Metal or Metal Oxide. In: *Energetic Nanomaterials. Synthesis, Characterization and Application*, Ch. 10. Amsterdam: Elsevier; 2016. P. 231-284. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802710-3.00010-6>

#### Об авторах:

**Карпушенкова Лариса Степановна**, кандидат химических наук, доцент, доцент кафедры физической химии Белорусского государственного университета (Республика Беларусь, 220030, Минск, ул. Ленинградская, д. 14). E-mail: [karpushenkava@bsu.by](mailto:karpushenkava@bsu.by). Scopus Author ID 6504468775, ResearcherID AAB-8934-2020, <https://orcid.org/0000-0002-8875-5568>

**Кабо Геннадий Яковлевич**, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры физической химии Белорусского государственного университета (Республика Беларусь, 220030, Минск, ул. Ленинградская, д. 14). E-mail: [kabo@bsu.by](mailto:kabo@bsu.by). Scopus Author ID 56261611100

**Блохин Андрей Викторович**, доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой физической химии Белорусского государственного университета (Республика Беларусь, 220030, Минск, ул. Ленинградская, д. 14). E-mail: [blokhin@bsu.by](mailto:blokhin@bsu.by). Scopus Author ID 7101971167, ResearcherID AAF-8122-2019, <https://orcid.org/0000-0003-4778-5872>



**About the authors:**

**Larisa S. Karpushenkava**, Cand. of Sci. (Chemistry), Associate Professor, Associate Professor of the Department of Physical Chemistry, Belarusian State University (14, Leningradskaya ul., Minsk, 220030, Republic of Belarus). E-mail: karpushenkava@bsu.by. Scopus Author ID 6504468775, ResearcherID AAB-8934-2020, <https://orcid.org/0000-0002-8875-5568>

**Gennadii Ya. Kabo**, Dr. of Sci. (Chemistry), Professor, Professor of the Department of Physical Chemistry, Belarusian State University (14, Leningradskaya ul., Minsk, 220030, Republic of Belarus). E-mail: kabo@bsu.by. Scopus Author ID 56261611100

**Andrey V. Blokhin**, Dr. of Sci. (Chemistry), Professor, Head of the Department of Physical Chemistry, Belarusian State University (14, Leningradskaya ul., Minsk, 220030, Republic of Belarus). E-mail: blokhin@bsu.by. Scopus Author ID 7101971167, ResearcherID AAF-8122-2019, <https://orcid.org/0000-0003-4778-5872>

*Поступила: 30.01.2020; Получена после доработки: 16.03.2020; Принята к опубликованию: 11.04.2020.  
Submitted: January 30, 2020; Reviewed: March 16, 2020; Accepted: April 11, 2020.*