研究論文

1

ヒドラジン/四酸化二窒素の縮小反応機構の構築

大南香織 *†, 小川博之 **, 林 光一 ***

*総合研究大学院大学物理科学科宇宙科学専攻 〒229-8510 神奈川県相模原市由野台3-1-1 [†]Corresponding address: ohminami@isas.jaxa.jp

**宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部 〒229-8510 神奈川県相模原市由野台3-1-1

***青山学院大学理工学部 〒229-8558 神奈川県相模原市淵野辺5-10-1

2007年11月30日 受付 2008年1月18日 受理

要旨

宇宙機の二液式推進薬として用いられるヒドラジンと四酸化二窒素について、気相の燃焼反応機構を縮小し新たな反応 機構を構築した。大南と小川による30化学種245素反応式から構成される詳細反応モデルに対し、感度解析を用いて23化学 種61素反応式まで反応規模の低減を行った。二液式スラスタの動作の範囲である酸化剤・燃料比(O/F)が0.82から1.84の 間で、縮小された反応機構の解析値は、燃焼ガス温度と組成について詳細反応機構における解析値および断熱火炎温度と平 衡計算による値によく一致する結果となった。また着火おくれ時間はO/F = 1.2で0.96 msecと文献値と合致する結果を 得た。温度、組成、着火おくれに対して、縮小しても有用な反応モデルを構築できたことから、スラスタCFD解析への適用 性を示したと考える。

1. 緒言

近年,科学ミッションをもつ探査機が多くなり,宇宙機の推進薬として、ターゲット天体へのスラスタ排気による汚染防止の観点からヒドラジン(N₂H₄)と四酸化二窒素(N₂O₄,以下「NTO」と略記)の炭素基を持たない燃料/酸化剤の組み合わせが求められるようになった。宇宙航空研究開発機構では、2003年打上げのHAYABUSAに、ヒドラジン-NTOを推進薬とした20N二液式スラスタを開発したが、推進薬の燃焼反応を含んだ理論モデルは構築されてない。そこで筆者らは、スラスタの設計ツールとなる数値モデルの構築の一環として、燃焼流体の数値シミュレーションのためのヒドラジン/NTOの反応機構の構築を行っている。

ヒドラジンとNTOの燃焼反応モデルの構築はこれまで なされてなかった。そこで、筆者らは2007年に詳細な燃焼 反応モデルの構築を行った¹⁾(以降、「大南・小川のヒドラジ ン-NTO部細反応モデル」と記す)。大南・小川のヒドラジ ン-NTOの詳細反応モデルは、N、H、Oの化学種を含む、 気体燃焼反応について検証された素反応モデルより構成し たもので、16文献による文献調査によって得たものである。 16文献のうち基本としたのはN/O系、N/H系、N/H/O 系に分けて112の反応について調査、記述したHansonらの 報告²⁾とし、それに1976年までの文献から1008の気体燃焼 反応を調査したWestleyの論文³⁾、窒素中のメタンの燃焼 を扱ったSongらの論文^{4)、5)}、酸素及び酸素と水素雰囲気 中でのバーナー火炎内のアンモニアの燃焼を扱った Miller らの論文^{6),7)}, ヒドラジンの熱分解反応について記述した Konnovと Ruyckの論文⁸⁾, NIST のデータベース⁹⁾より素 反応式を追加及び追加検討をし,基本となる反応モデルを 組み立てた。それに比較的新しい文献である Baulchらの 論文¹⁰⁾を中心に,ParkとLin¹¹⁾, Davidsonら¹²⁾, Atkinson ら¹³⁾, Glarborg ら¹⁴⁾, Cohen と Westberg¹⁵⁾, Bozzelii¹⁶⁾, Tsangと Hampson¹⁷⁾の論文にある素反応モデルをを追加 し,N,H,Oを含む素反応式に対して追加および再検討を して構築したものである。

本報告では、構築された詳細反応モデルから、スラスタ 解析に適合するように素反応の絞込みを行い、反応規模(含 まれる素反応数)の縮小を行う。縮小化した反応モデルに 対して0次元の燃焼計算を行い、実験値、理論値との比較 をすることで構築したモデルの検証をし、また、詳細反応 モデルとの比較により、縮小化の妥当性を検証した。

2. 解析手法

大南・小川のヒドラジン-NTO詳細反応モデル¹⁾は,245 素反応30化学種を含む。この反応機構は流体解析には規模 が大きすぎることから,温度による感度解析により反応を 絞り込み,縮小反応機構の構築をはかった。尚,本文中の 反応番号は文献1に示されている反応番号と同じものを用 いている。

スラスタ燃焼室内部では燃焼は高温になること, 圧力は

	Table 1 Simulation conditions.							
case No.	17	20	22	23	21	19	16	
Pc[MPa] O/F	0.581 1.84	0.654 1.57	0.715 1.36	0.764 1.21	0.720 1.09	0.671 0.96	0.643 0.82	

Table 2	Table 2 Gas temperatures (Case 23: $O / F = 1.2$).								
反応モデル	反応数	最終到達温度	最終到達温度						
		(K)	$\times 10^{-4}$ (sec)						
全反応モデル	245	3307	9.62						
上位50反応モデル	64	3316	6.14						
上位47反応モデル	59	3348	6.14						
上位45反応モデル	55	3163	6.14						
断熱火炎温度	—	3317	—						

1 MPa以下であることを考え,詳細反応モデルのうち低温 (500 K以下)で定義されている反応は除き,圧力依存は考慮 せず修正Arrhenius型による素反応の定義を行った。その 反応機構に対し,SENKIN (CHEMKIN-II, Ver.4.5に含まれ る)を用いて温度についての感度解析を行った。

素反応で構成される反応機構において,化学種j個,反応数i個からなる,ある均一化学反応系における支配方程式 は

$$Y_j = F_j(Y_j, t; k_i); \quad i = 1, 2, \dots, I$$
 (1)

の連立一階常微分方程式からなる。*Y_i*は第*j*種の化学種質 量分率を,*k_i*は第*i*番目の反応の反応速度定数を表す。*k_iを* 系のパラメータと見た場合,第*i*番目の反応の第*j*種の化学 種質量分率に対する1次の規格化された感度係数(第*i*番目 の反応が第*j*種の生成・消費に及ぼす影響)は下記のように 定義することができる。

$$S_{ij} = \frac{k_i}{Y_i} \frac{\partial Y_j}{\partial k_i} = \frac{\partial \ln Y_j}{\partial \ln k_i}$$
(2)

感度係数が大きいほど第i番目の反応が第j種の生成・消費 に及ぼす影響が大きいということであり、その時点で第i 番目の反応が律速であることを示す。第j種の化学種の質 量分率に対してだけではなく、系の温度Tに関しても同様 に感度係数を定義することができる。

$$S_{iT} = \frac{k_i}{T} \frac{\partial T}{\partial k_i} = \frac{\partial \ln T}{\partial \ln k_i}$$
(3)

本研究では,スラスタ内部での燃焼温度の予測が重要とる ため,温度に対する感度解析を実施し,解析時間を通じた 感度係数の積分値を用いて縮小化を進めた。

解析は試験と同条件とするため、O/Fのほかに燃焼圧を あわせた。解析条件をTable 1 に示す。

3. 結果

3.1 反応モデルの縮小規模の検討

詳細反応モデルに対し, *O*/*F*をパラメータとした感度解 析を行った。計算時間を通して, 各*O*/*F*のケースで感度係 数の積分値が高い上位1-50位の反応を抽出すると, 全64反 応式となった。Case23(*O*/*F* = 1.2での感度係数積分値が, 上位50位, 47位, 45位までの反応機構における, 系の最終 到達温度, 着火おくれ時間を, 断熱火炎温度の計算と共に Table 2に示す。

Table 2の温度比較より,最適解が上位50-47反応モデル の間にあると考え,その間にある反応式を上位47反応モデ ルに1反応ずつ当てはめて最終到達温度を確認したところ, 反応223のみ温度に対する影響を確認した。反応223の追 加により上位47モデルの最終到達温度は,Case23(O/F= 1.2)で3348 Kから3316 Kとなり,断熱火炎温度3317 Kとほ ぼ同等の結果を得ることができた。

一方,着火おくれ時間は上位50反応モデルに縮小した時 点で既に着火おくれ時間は詳細反応における解析値と比較 すると36%小さくなっている。そこで次に,詳細反応機構 の反応のうち,上位50反応モデルに組み込まれていない反 応を検討することで着火おくれ時間に影響のある反応を調 べた。結果,反応84を検出した。反応84は反応88の逆反応 で,Konnovらによる値⁸⁾を参照していたが,反応88から逆 反応の反応84の値を見積もるだけでは不十分であり,反応 84の参照値であるHanson²⁾の値を入れることで,着火おく れ時間が0.92 msecとなりを詳細反応モデルと一致させる ことができた。23化学種61反応式からなる縮小した反応機 構を,反応式と反応速度定数の式におけるArrheniusパラ メータとしてTable 3に示す。

3.2 着火おくれ時間に関する結果

O / *F* = 0.82-1.84 ケースでの着火おくれ時間結果を Fig.1に示す。

O / F = 0.82−1.84で、着火おくれ時間は、縮小反応機構は詳細反応機構における結果によく一致した。また、 O / F = 0.82−1.84の間で、着火おくれ時間は0.4−6.8 msecと1オーダーの違いを生じていること、O / Fの減少、即ち

•

No.								5	Temp. range (K)	А	В	E/R
N / O reaction												
7	N_2O_4 -	+ 1	M =	NO_2	+	NO_2	+	M (M - N ₂)	300-500	$2.03E \pm 28$	-38	6400
24	NO -	+ N	+ OI	O_2	=	NO_2	+	NO_2	273-660	1.20E + 09	0.0	-530
26	NO ₂ -	+ N	+ 0	O_2	=	NO_2	+	NO_3	300-500	2.90E + 07	0.0	-400
$\frac{28}{32}$	$NO_3 - NO_2$	+ N	$IO_2 =$	NO ₂ NO	++	NO ₂ NO	+	O_2	600-2000	1.30E + 14 2.00E + 12	0.0	13500
33	NO_2 -	+ N	$IO_2 +$	Μ	=	N_2O_4	+	M	200 500	4.215 . 15	2.0	0
34	NO ₂ -	+ N	IO ₃ =	NO	+	NO_2	+	$(\mathbf{M} = \mathbf{N}_2)$ \mathbf{O}_2	300-500 300-850	4.31E + 15 1.40E + 11	-3.8 0.0	1600
N / H reaction												
35	NNH =	= 1	$N_2 + M_2 - M_2$	H		NU		м		3.00E + 08	0.0	0
38	N H	- 1 . 1	M –		т ,	ин ₂ ц	т ,	(M = Ar)		3.98E + 15	0.0	20600
30	N.H.	- 1 . 1	M –	NH.	т ,	NU	т ,	(M = Ar)		1.00E + 17	0.0	16617
40	N ₂ H ₂	- 1 - 1	M –		т 	н	т _	(M = Ar)		5.00E + 16	0.0	30214
40	182112 -	т 1	WI –	ININII	т	11	т	(M = Ar)		5.00E + 16	0.0	25178
49 54	$N_2H_4 - N_2H_4$	+] - 1	Н =	N_2H_3	+	H_2				7.00E + 12 5 00E + 13	0.0	1259
62	N_2H_4 -	+ N	H = H	NH ₂	+	N_2H_3				1.00E + 09	1.5	1007
71	N_2H_4 -	+ N	$H_2 =$	N_2H_3	+	NH_3			300-2000	1.80E + 06	1.7	-706
73	$N_2H_3 - N_2H_2$	+ N	$H_2 = H_2 =$	NNH	++	NH ₃				1.00E + 11 1.00E + 13	0.0	504
75	NH ₂ -	+ N	$H_2 +$	Μ	=	N_2H_4	+	M (M Arr)		2.005 . 20	1.0	0
84	N_2H_4 -	+ N	$_{2}H_{2} =$	N_2H_3	+	N_2H_3		$(\mathbf{M} = \mathbf{AI})$		2.51E + 10	-1.0	15000
85	N_2H_3 -	+ N	${}_{2}H_{2} =$	N_2H_4	+	NŇĤ				1.00E + 13	0.0	3021
86 87	$N_2H_2 - N_2H_3 - N_2H_3$	+ N ₂ + N	${}_{2}H_{2} =$	NNH NH ₃	++	N_2H_3 NH ₃	+	N_2		1.00E + 13 3.00E + 12	0.0	5000
88	N_2H_3 -	+ N	${}_{2}H_{3} =$	N_2H_4	+	N_2H_2		1.12		1.20E + 13	0.0	ŏ
N/H/O reaction												
96 07	HONO =	= C)H +	NO		NO		м	300-2500	3.01E + 30	-3.8	25340
97	HNO -	+ 1 . 1	NI =	П	+		+	$(M = H_2)$	230-750	2.29E + 17	-0.3	23180
98	HNO ₃ -	+ 1	M =		+	UH	+	(M = Ar)	800-1200	1.60E + 15	0.0	15400
126 127	N ₂ H ₄ - N ₂ H ₃ -	+ C + C)H =)H =	N_2H_3 N_2H_2	++	H ₂ O H ₂ O				5.00E + 12 1.00E + 13	$0.0 \\ 0.0$	504 1000
129	N_2H_2 -	+ Č)H =	NNĤ	+	H_2O				1.00E + 13	0.0	504
131	NH ₃ -	+ C)H =	$\frac{NH_2}{NO}$	+	H ₂ O			225-3000	5.00E + 07 1.60E + 12	1.6	480 755
138	N ₂ O -	+ C	H = H	N ₂	+	HO_2				2.00E + 12	0.0	5036
143	NO -	+ C)H +	М	=	HONO	+	M (M - N ₂)		$1.00E \pm 28$	2.5	-34
145	HONO -	+ C)H =	NO_2	+	H_2O		$(\mathbf{W} = \mathbf{W}_2)$		4.00E + 12	0.0	0
147	N_2H_4 -	+ H	$[O_2] =$	N_2H_3	+	H_2O_2			200 2000	3.98E + 13	0.0	1000
164	NO -	+]	H +	M ²	=	HNO	+	М	200-2000	2.031 + 12	0.0	-250
165	NO ₂	L 1	н –	NO	+	ОН	+	$(\mathbf{M}=\mathbf{H}_2)$	230-750	1.53E + 18 3.47E + 14	-0.8	$\begin{array}{c} 0\\740\end{array}$
166	NO_2 -	+ 1	H =	HONO		on			1500-2500	3.20E + 14	0.0	750
168 176	$N_2O - NO$	+]	H =	N_2	+	OH				2.20E + 14	0.0	8430
170	NO -	+ N	H =	N_2	+	OH				4.33E + 14 2.40E + 12	0.0	0
179	NO ₂ -	+ N	H =	HNO	+	NO				1.00E + 11	0.5	2000
180	HONO -	+ N + N	H = H	$\frac{N_2O}{NH_2}$	++	NO ₂				1.00E + 13 1.00E + 13	0.0	0
183	NO -	+ N	$H_2 =$	N_2	+	$H_2\tilde{O}$			300-1000	8.28E + 14	-0.9	-192
184	NO -	+ N	(H ₂ =	N_2	+	н	+	ОН	294-1200	3.40E + 14 6.31E + 19	-1.0 -2.5	-1334 950
185	NO -	+ N	$H_2^2 =$	NNH	+	OH	·	011	1000-2000	9.19E + 22	-3.0	4829
188	NO ₂ -	+ N ⊾ H	$H_2 = NO =$	N ₂ O HONO	+	H ₂ O NO			300-1600	1.66E + 14 6 00E + 11	-0.7	1007
205	N_2H_2 -	+ N	$\frac{100}{10} =$	N ₂ O	+	\overline{NH}_2				3.00E + 11	0.0	0
207	NNH -	+ N - HC	NO = 0	N_2	+	HNO NO.	т	Н.О		5.00E + 13 2 30E + 12	0.0	0 4230
213	nono	F IIC	- 0110	NO	т	1002	т	$\Pi_2 O$		2.301 + 12	0.0	4230
H / O reaction	0, -	+ 1	н +	М	=	HO_2	+	М				
229	02 Н	- C	лн т	м	_	H ₂ O		$(M = N_2)$	298-2000	2.65E + 19	-1.3	0
222		. C	··· *	111	-		1.	$(M = N_2)$	300-3000	2.21E + 22	-2.0	0
233	Н - н.	+ H ⊧ C	$l_2O = DH =$	OH H	+ +	H_2			800-2500	4.52E + 08 2 17E + 08	1.6 1.5	9030 1740
241	OH -	+ H	$_{2}O_{2} =$	HO_2	+	H_2O H_2O			300-800	1.00E + 13	0.0	910
244	H ₂ O -	+ 1	M =	Н	+	OH	+	$M (M = N_2)$	2000-6000	4.82E + 15	0.0	52920
245	H ₂ O ₂ -	+ 1	M =	OH	+	OH	+	\dot{M} (M = N ₂)	700-1500	1.20E + 17	0.0	22900
								(M = Ar)	1000-1500	2.29E + 16	0.0	21960

 Table 3 Reactions and rate constants* used in the reduced hydrazine-NTO chemical reaction mechanism.

*. Rate constants are defined by $k = AT^{B} \exp(-E / RT)$ and in units cm, mole, s, and K.



Fig. 1 Ignition delay time (O/F = 0.82 - 1.84).



Fig. 2 Gas temperatures and adiabatic flame temperatures (O/F = 0.82-1.84).







酸化剤量の減少により着火おくれ時間が極端に小さくなっ ていることがわかる。ヒドラジン-NTOの推薬での燃焼室 内部の数値シミュレーションをする際, O/Fに応じた着火 おくれ時間を考慮できるようなモデルが必要になるため, 本縮小反応機構は0/Fに応じた着火を表現できスラスタ のシミュレーションの燃焼モデルに有用であると考える。 WeissとJohnson¹⁸⁾は液体のヒドラジンに1%程度の添加 物を混ぜて液体のN2O4と反応させ、それぞれの添加物によ る着火おくれ時間への影響を調べた。O/Fは1.22である。 このとき、添加物を加えないヒドラジンとN2O4の着火おく れ時間は約3 msecとなっている。また、酸化剤である液体 N₂O₄に気化したN₂O₄を混ぜてヒドラジンと反応させた場 合の着火遅れ時間は約1 msecとしている。Fig.1より縮小 反応/詳細反応機構による0/F=1.2での着火おくれ時 間は0.96 msec であり, 解析は気相反応で扱っていることか ら,実際の現象には後者が近く,同程度となる結果を得た といえる。また、本解析ではヒドラジンも気体として扱っ ているため液体の状態よりも着火しやすいと考えられるこ

とから,解析値が1msecより小さいのは妥当であると考えられる。

3.3 燃焼温度の結果

詳細/縮小反応機構における系の最終到達温度の結果 を,断熱火炎温度と共にFig.2に示す。

Fig.2より,縮小反応機構の結果は0.3-0.9%高くなった がほぼ一致しているといえる。また最終到達温度とO/Fの関係では、両モデルとも $O/F = 1.2 \sim 1.3$ の付近で最高温 度となる。つまり、反応モデルの縮小を行っても系の温度 計算はほぼ同じに保たれており、反応のメカニズムも保た れていると推測される。Fig.3はCase23 (O/F = 1.2)にお ける、詳細/縮小反応機構における系の温度の時間変化を 表したものである。

詳細/縮小反応機構とも着火は0.96 msecで生じており, 系の温度は10 µsec間の非常に短い間に,2000 Kもの急激な 上昇をしている。詳細反応機構と比較し,縮小反応機構で の温度上昇のほうが,定常に達する燃焼温度となるあたり でやや緩やかな変化を見せるものの, ほとんど変わらない 温度カーブを示している。このことからも, 反応モデルの 縮小を行っても, 温度的な観点からは元の詳細反応機構の 反応メカニズムが保たれているといえる。

またFig.2から, 縮小反応機構による最終到達温度は断熱 火炎温度と非常によく一致しているといえる。特にO/F が小さい領域からからO/Fの当量付近において差はな く, O/Fが大きいケースでも差は0.6%と非常に小さい。 すなわち, この縮小反応機構は温度の算出においては, O/F=0.82-1.84の間で理論計算と合致し, 燃焼温度を解 析するのに有用であるといえる。

3.4 平衡状態での燃焼ガスの化学組成の結果

+分に長い時間がたち平衡とみなせる状態での系の化学 種のモル分率をCase16 (*O* / *F* = 1.84), 17 (*O* / *F* = 0.82), 23 (*O* / *F* = 1.21) について理論平衡計算によるモル分率と ともにFig.4に示す。

縮小反応機構による系の最終化学組成は詳細反応機構及 び平衡計算とほぼ一致していることがわかる。ただ,縮小 反応機構には,Table3に示すように,反応を低減する過程 で酸素原子Oに関する反応が取り除かれたことから,化学 種Oの生成はない。一方平衡計算,詳細反応による計算で は化学種Oが存在する。この化学種Oの差はO/Fが大き いケースでは大きくなる傾向にあり,これがFig.2における O/Fが高いケースにおいて,燃焼温度の差が多少開いてい る要因と考えられる。しかしながら,平衡計算においても 全体の組成のうち化学種Oのモル分率は最大で0.02で非常 に小さいことから,O/F=0.82-1.84の間ではその影響は 小さいと考えられる。

4. 結果

ヒドラジン-NTOの燃焼反応について、スラスタの数値 シミュレーションに取り込むために温度に関する感度解析 を用いて縮小化を図った。縮小されたモデルは61反応23化 学種より構成され、

- 着火おくれ時間は0.96 msecで、詳細反応機構における ものと一致し、また実験結果と比較しても妥当な範囲で ある、
- 2)系の温度上昇は詳細反応機構におけるものと一致し、系の最終到達温度はO/F=0.82-1.84の間で断熱火炎温度とよく一致をする、
- 3) 系の最終化学組成は、平衡計算による組成とほぼ一致を する、

といえた。

また,反応規模を245から61反応に縮小できたことで, スラスタのCFD解析における計算負荷を減らし有用な反 応モデルを構築できたと考える。燃料が徐々に燃焼反応ガ スに取り込まれるようなフィルムクーリングのシミュレー ションには,この縮小反応機構を用いることで,時間的な 変化,酸化剤/燃料の濃度比に応じた反応を表現すること が可能となるであろう。

References

- K. Ohminami, and H. Ogawa, Space Technology Japan, The Japan Society for Aeronautical and Space Science, 6, 55 (2007).
- R. K. Hanson and S. Salimian, "Survey of Rate Constants in the N / H / O System, Combustion Chemistry", Chapter 6 (1984), Springer-Verlag.
- 3) F. Westley, NBS Report #NSRDS-NBS 67 (1980).
- 4) Y. H. Song, D. W. Blair, V. J. Siminski, and W. Bartok, Eighteenth Symposium (International) on Combustion, pp. 53-63 (1981), The Combustion Institute.
- 5) Y. H. Song, and W. Bartok, Nineteenth Symposium (International) on Combustion, pp. 1291-1299 (1982), The Combustion Institute.
- J. A. Miller, M. D. Sooke, R. M. Green, and R. J. Kee, Combustion Science and Technology, 34, pp. 149-176 (1983).
- 7) J. A. Miller, M. C. Branch, W. J. Mclean, D. W. Chandler, M. D. Sooke, and R. J. Kee, Twentieth Symposium (International) on Combustion, pp. 673-684 (1984), The Combustion Institute.
- 8) A. A. Konnov, and de J. Ruyck, Combustion and Flame, 124, 106, pp. 106-126 (2001).
- 9) W. G. Mallard, J. T. Herron, R. F. Hampson, and D. H. Frizzell, NIST Standard Reference Database17 : Chemical Kinetics Database, ver. 2Q98 for WINDOWS, U. S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program (1988).
- 10) D. L. Baulch, C. T. Bowman, C. J. Cobos, R. A. Cox, Th. Just, J. A. Kerr, M. J. Pilling, D. Stocker, J. Troe, W. Tsang, R. W. Walker, and J. Warnatz, J. Phys. Chem. Ref. Data, 34, pp. 757-1397 (2005).
- 11) J. Park, and M. C. Lin, J. Phys. Chem. A, 101, pp. 5-13 (1997).
- 12) D. F. Davidson, K. Koshe-Hoinghaus, A. Y. Chang, and R. K. Hanson, Int. J. Chem. Kinet., 22, pp. 213-235 (1990).
- 13) A. Atkinson, D. L. Baulch, R. A. Cox, R. F. Hampson, J. A. Kerr, M. J. Rossi, and J. Troe, J. Phys. Chem. Ref. Data, 26, pp. 1329-1499 (1997).
- 14) P. Glarborg, K. Dam-Johansen, J. A. Miller, R. J. Kee, and M. E. Coltrin, Int. J. Chem. Kinet., 26, pp. 421-436 (1994).
- 15) N. Cohen, and K. R. Westberg, J. Phys. Chem. Ref. Data, 20, pp. 1211-1311 (1991).
- 16) J. W. Bozzelli, A. Y. Chang, and A. M. Dean, Twentyfifth Symposium (International) on Combustion, pp. 965-974 (1994).
- 17) W. Tsang, and R. F. Hampson, J. Phys. Chem. Ref. Data, 15, pp. 1087-1279 (1986).
- 18) H. G. Weiss, B. Johnson, H. G. Fisher, and M. Gerstein, AIAA Journal, 2, 2222 (1964).

Development of a reduced chemical kinetic model of hydrazine and di-nitrogen tetroxide

Kaori Ohminami*[†], Hiroyuki Ogawa**, and A. Koichi Hayashi***

Hydrazine (N₂H₄) and NTO (dinitrogen tetroxide: N₂O₄) mixtures are used in spacecraft bipropellant systems, having the advantage, for sampling missions, of having no carbon composition. However, no reasonable hydrazine and NTO combustion model has been developed. To construct a hydrazine and NTO combustion model that is useful for bipropellant thruster CFD simulation, we extracted efficient elementary reactions from detailed kinetic reaction model proposed by Ohminami and Ogawa in 2007. The reduced hydrazine and NTO combustion model was composed of 61 extracted reactions with 23 chemical species and was coincident with the original detailed kinetic reaction model in terms of combustion gas temperatures and ignition delay times over O / F (oxidizer and fuel mass ration) = 0.82-1.84. Also the simulated combustion gas temperatures were good agreed with the adiabatic flame temperatures, and the simulated ignition delay time at O / F = 1.2 was consistent with the literature value.

Keywords: Hydrazine, di-Nitrogen tetroxide, NTO, Reaction mechanism.

*Department of Space and Astronautical Science, The Graduate University for Advanced Studies, 3-1-1 Yoshinodai, Sagamihara, Kanagawa 229-8510, JAPAN

[†]Corresponding address: ohminami@isas.jaxa.jp

**Japan Aerospace Exploration Agency (JAXA), Institute of Space and Astronautical Science (ISAS), 3-1-1 Yoshinodai, Sagamihara, Kanagawa 229-8510, JAPAN

***Aoyama Gakuin Univercity, 5-10-1 Fuchinobe, Sagamihara, Kanagawa 229-8558, JAPAN