

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА САМОРАСПРОСТРАНЯЮЩЕГОСЯ
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СИНТЕЗА**М.Б. Лабыкин, Е.В.Шкляренко

Научный руководитель: доцент, к.ф.т.н. Д.С. Исаченко

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: mb11@tpu.ru**MODELING SELF-PROPOGATING HIGH-TEMPERATURE SYNTHESIS**M.B. Labykin, E.V. Shklyarenko

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Yu.Yu. Isachenko

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: mb11@tpu.ru

***Annotation.** Preparation of materials for various fields of technology plays an important role in the modern world, one of the technologies which is self-propagating high-temperature synthesis. SHS is one of the promising areas of materials science, as the products obtained by it have a set of optimal and efficient properties is achieved by the presence in the structure of phase with complementary physicochemical and other parameters. Running in parallel with the main emphasis is on the modeling of physical experiments. Simulation of combustion systems - complex process for its solution requires a different approach. One such approach is the model of a nonstationary heat equation. Solving this problem allows to determine the temperature fields in time and for thermal fields can predict the composition of the end products.*

Получение материалов для различных областей техники играет большую роль в современном мире, одной из технологий получения является самораспространяющийся высокотемпературный синтез. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез – одно из перспективных направлений материаловедения, так как продукты, получаемые при нём, обладают набором оптимальных и эффективных свойств, достигающихся наличием в структуре фаз с взаимодополняющими физико-химическими и другими параметрами [1-2].

Параллельно с этим основной упор идет на моделирование физических экспериментов. Моделирование систем горения – сложный процесс, для его решения требуются различные подходы. Одним из таких подходов является модель нестационарного уравнения теплопроводности. Совместно с моделью используется квантовая модель Дебая для определения зависимости теплоемкости продуктов горения от температуры. Такой подход позволяет определить адиабатическую температуру, как функцию ряда параметров: плотности реакционной системы, соотношения масс исходных реагентов, начальной температуры процесса [3].

Особенностью данной методики является использование квантовой модели Дебая для определения температурной зависимости теплоемкости продуктов горения. Эта модель, в отличие от традиционных методик расчета теплоемкостей, основанных на аппроксимации экспериментальных данных по

«ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУК»

теплоемкостям, позволяет определить адиабатическую температуру горения как функцию ряда параметров состояния системы: плотность реакционной системы, массовое соотношение компонентов в шихте исходных реагентов, начальная температура процесса[4].

Согласно квантовой модели Дебая теплоемкость при постоянном объеме определяется как:

$$C_v(T) = 9Nnk \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{\theta/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2},$$

где $\theta = \frac{hC_0}{k} \left(\frac{9N}{4\pi V} \right)^{1/3}$ – температура Дебая, h – постоянная Планка, k – постоянная Больцмана, N –

концентрация молекул вещества, n – число атомов, содержащихся в N молекул, V – объем, занимаемый веществом, C_0 – скорость звука в рассматриваемом веществе, T – текущая температура вещества[4].

Одной из сложностей при определении функции теплоемкости по модели Дебая является расчет интеграла, который в аналитическом виде берется только в области больших (порядка 100), либо малых температур (порядка 0,10). Выход из сложившейся ситуации является расчет интеграла. Для расчета адиабатических температур горения необходимо использовать значения температурной зависимости теплоемкости при постоянном давлении.

$$C_p(T) = C_v(T) + T \cdot V \cdot \alpha^2 \cdot B_s$$

Согласно основам термодинамики связь между теплоемкостями при постоянном давлении C_p и постоянном объеме C_v где α – коэффициент объемного расширения, B_s – молярный либо удельный объем (в зависимости от того, в каких единицах измерения необходимо выразить теплоемкость) [4].

Основной задачей проведения расчетно-теоретического анализа является определение температурных полей, создаваемых в процессе СВС, и конечного фазового состава продукта реакции. Поскольку режим СВС – многостадийный режим, то каждой стадии процесса соответствует определенный температурный режим. Зная распределение температуры по объему синтезируемого вещества, можно спрогнозировать возможный фазовый состав и свойства получаемого материала[5].

Для решения этой задачи использовалась модель, основанная на нестационарном двухмерном уравнении теплопроводности:

$$a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{q_v}{C(T) \cdot \rho} = \frac{\partial T}{\partial t},$$

где a – коэффициент температуропроводности, $C(T)$ – температурная зависимость теплоемкости, ρ – плотность образца, q_v – объемный источник тепловыделения[6].

Особенностью предложенного подхода является использование при численном решении уравнения температурных зависимостей теплоемкости, рассчитанной согласно квантовой модели Дебая, и температуропроводности (на первом этапе использовались эмпирические соотношения, взятые из литературных источников).

Наибольшие трудности при моделировании горения возникают при описании различных физических процессов. В волне горения происходит трансформация вещества, что приводит к изменению ряда свойств, таких как плотности, теплопроводности, теплоемкости. Исходя из этого, весь образец можно условно разделить на три зоны (рис. 1): прореагировавшая зона (зона 1), зона реакции (зона 2) и зона до реакции (зона 3) [3].

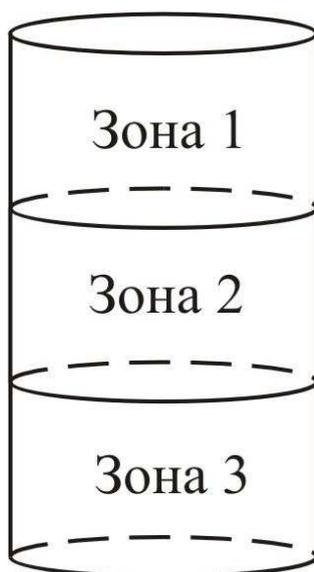


Рис. 1. Условное деление образца на зоны реакции

Особенностью такого подхода является использование температурных зависимостей теплоемкости по Дебаю и температуропроводности. Неизбежны трудности, возникающие при описании некоторых физических процессов. В волне горения происходит трансформация вещества, следовательно, изменяются плотность, теплопроводность, теплоемкость. Возникает необходимость разделить образец на три условные зоны: прореагировавшая зона (зона остывания), зона реакции (процесс горения с большим выделением тепла) и зона до реакции. Решение этой задачи позволяет определить температурные поля во времени, по которым можно прогнозировать состав конечных продуктов[4].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Д. О. Московских, А. С. Мукасян, А. С. Рогачев Самораспространяющийся высокотемпературный синтез нанопорошков карбида кремния // Доклады академии наук, 2013, том 449, № 2, с. 176–179.
2. В.В. Евстигнеев Самораспространяющийся высокотемпературный синтез. Современные проблемы // Ползуновский вестник №4-1 2005. С. 21-35.
3. Демянюк Д.Г., Исаченко Д.С., Рышкевич М.П. Основы расчетно-теоретического анализа самораспространяющегося высокотемпературного синтеза борсодержащих материалов физико-энергетических установок // X юбилейная Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Современная техника и технологии". Труды. В 2-х т. – Томск: Изд-во Томского политехн. ун-та, 2004. С.33-34.
4. Бойко В.И., Долматов О.Ю., Нужин О.А., Шаманин И.В. Направленный самораспространяющийся высокотемпературный синтез ряда взрывоэмиссионных металлокерамических материалов // Физика горения и взрыва. 1996 г. Т.32. №1 С.58-65.
5. Новиков Н.П., Боровинская Н.П., Мержанов А.Г. Термодинамический анализ реакций самораспространяющегося высокотемпературного синтеза // Процессы горения в химической технологии и металлургии. – Черноголовка, 1975. С.174-188.
6. Кочержинский Ю.А., Шишкин Е.А., Падерно Ю.Б. и др.// Высокотемпературные бориды и силициды. – Киев: Наукова думка, 1978. С.47-50.