

Список литературы:

1. Бекман И.Н. Курс лекций. Лекция 7 «Ядерная медицина». - 2005 г.
2. Информационно аналитический портал агентства ядерной медицины.
3. Климанов В.А. Радиобиологическое и дозиметрическое планирование лучевой и радионуклидной терапии. - 2011 г.

Моделирование процесса самораспространяющегося высокотемпературного синтеза

М.Б. Лабыкин, Е.В. Шкляренко

labykin96@gmail.com

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

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Физико-технический институт, начальник учебного отдела

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 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:

$$C_V(T) = 9Nnk \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{\theta/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}, \quad \theta = \frac{hC_0}{k} \left(\frac{9N}{4\pi V} \right)^{1/3},$$

где 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].

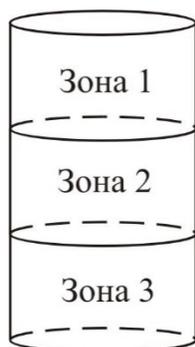


Рис. 1. Условное деление образца на зоны реакции

Особенностью такого подхода является использование температурных зависимостей теплоемкости по Дебаю и теплопроводности. 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.