

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛА ПРИ ПРОВЕДЕНИИ СИНТЕЗА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ ЯДЕРНОЙ ТЕХНИКИ В РЕЖИМЕ СВС

М.М. Балачков

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: mmb2@tpu.ru

Использование метода самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) является перспективным для производства многих функциональных материалов ядерной техники, таких как ядерное топливо, материалы защиты и материалы, способные иммобилизовать радиоактивные отходы. Суть СВС заключается в использовании экзотермических реакций, протекающих в шихте для получения необходимых химических соединений.

Для упрощения модели будем считать, что в процессе СВС происходит только перенос тепла, а химические реакции проходят в одну стадию. Тогда система в цилиндрических координатах будет описываться с помощью следующих уравнений [1]:

$$c \cdot \rho \cdot \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \cdot \Delta u + f(r, z, u, \eta); \quad \frac{d\eta}{dt} = k(u) \cdot \varphi(\eta),$$

где c – удельная теплоёмкость образца; ρ – плотность образца; u – температура; λ – коэффициент теплопроводности образца; $f(r, z, u, \eta)$ – функция тепловых источников; r, z – координаты по радиусу и высоте соответственно; t – время; η – массовая доля продукта химической реакции; $k(u)$ – температурно-активационная функция; $\varphi(\eta)$ – кинетическая функция протекания химической реакции.

Функция тепловых источников и две последние функции описываются уравнениями, приведёнными ниже:

$$f(r, z, u, \eta) = Q \cdot \rho \cdot k(u) \cdot \varphi(\eta); \quad k(u) = k_0 \cdot \sqrt{u} \cdot e^{-\frac{E_a}{R \cdot u}}; \quad \varphi(\eta) = e^{-m_s \cdot \eta} \cdot \eta^{-n_s} \cdot (1-\eta)^{n_c},$$

где Q – удельный тепловой эффект реакции; k_0 – предэкспоненциальный множитель;

E_a – энергия активации химической реакции; R – постоянная Больцмана. m, n_s – параметры торможения; n_c – порядок химической реакции.

Обычно СВС производят в вакууме, а сам образец располагается на несгораемой слабо проводящей тепло подложке и предварительно подогрет, в связи с этим граничные и начальные условия примут следующий вид:

$$\lambda \cdot \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{z=H} = -\varepsilon \cdot \sigma_B \cdot (u^4 - u_e^4); \quad \lambda \cdot \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0; \quad \lambda \cdot \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=R} = -\varepsilon \cdot \sigma_B \cdot (u^4 - u_e^4); \quad u|_{t=0} = u_0; \quad \eta|_{t=0} = 0,$$

где H, R – высота и радиус образца соответственно; u_e – температура окружающей среды;

ε – степень черноты тела; σ_B – постоянная Стефана-Больцмана, u_0 – начальная температура образца.

Теплоёмкость и теплопроводность в любой момент времени определяются с помощью следующих соотношений:

$$c = c_f \cdot \eta + (c_1 \cdot \eta_1 + c_2 (1 - \eta_1)) \cdot (1 - \eta), \quad \lambda = \lambda_f \cdot \eta + (\lambda_1 \cdot \eta_1 + \lambda_2 (1 - \eta_1)) \cdot (1 - \eta),$$

где $c_{f, 1, 2}$ – удельная теплоёмкость готового продукта, первого и второго реагентов соответственно; $\lambda_{f, 1, 2}$ – коэффициент теплопроводности готового продукта, первого и второго реагентов соответственно; η_1 – массовая доля первого реагента в начальной смеси реагентов.

Для верификации построенной математической модели были проведены эксперименты по синтезу двух соединений: NiAl и WB. При подготовке шихты соотношение реагентов подбиралось равным 1:1 по количеству вещества. Температурный режим синтеза контролировался комплексом вольфрам-рениевых термопар. Необходимые константы взяты из [2–6]. Результаты эксперимента и моделирования приведены на рисунках 1 и 2.

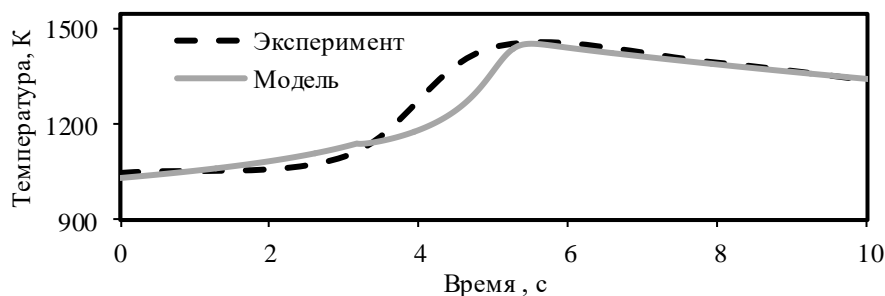


Рис. 1. Термограмма синтеза никель-алюминия

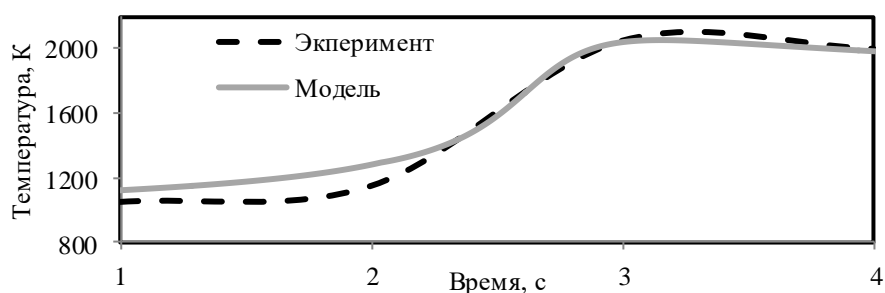


Рис. 2. Термограмма синтеза борид вольфрама

Из приведённых рисунков видно, что модель и эксперимент согласуются по характеру нагрева и максимальной температуре достигнутой в процессе синтеза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Князева А.Г. Макрокинетика: понятия, определения, приложения: учебное пособие. – Томск: Изд-во Типография ООО «С-принт», 2014. – 36 с.
2. Смитлз К. Дж. Металлы: Справ. изд. Пер. с англ. – М.: Металлургия, 1980. – 447 с.
3. Елманов Г.Н. Том 1. Физика твердого тела / Г. Н. Елманов, А. Г. Залужный, В. И. Скритный, Е. А. Смирнов, В. Н. Яльцев – М.: МИФИ, 2007. – 636 с.
4. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах: Справ. изд. / В.Е. Зиновьев. – М.: Металлургия, 1989. – 384 с.
5. Самсонов Г.В., Виноцкий И.М. Тугоплавкие соединения / Г.В. Самсонов, И.М. Виноцкий. – М.: Металлургия, 1976. – 559 с.
6. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники / В.С. Чиркин. – М.: Атомиздат, 1968. – 484 с.