

МОДЕЛЬ СИНТЕЗА МЕТАЛО-МАТРИЧНОГО КОМПОЗИТА С ДИФФУЗИОННОЙ РЕАКЦИОННОЙ ЯЧЕЙКОЙ

Крюкова О.Н., Князева А.Г., Чумаков Ю.А.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

okruk@ispms.ru,
anna-knyazeva@mail.ru,
chya@ispms.ru

В настоящее время существует несколько подходов для моделирования синтеза металломатричных композитов с учетом гетерогенной структуры. Среди них подход, опирающийся на осредненное описание теплообмена в системе, когда эффективные свойства учитывают свойства составляющих реакционной смеси, а кинетические функции отражают сложный механизм реакции на микроуровне и торможение реакций слоем образовавшихся продуктов; подход с введением так называемых реакционных ячеек, когда структура продукта заменяется некоторым идеализированным объектом, в котором последовательность реакций задается в соответствии с равновесными диаграммами состояния. Выбор того или иного способа описания зависит от изучаемой системы и целей исследования.

При моделировании процессов безгазового горения и теплового взрыва с учетом гетерогенности структуры вводится понятие «реакционной ячейки», в которой в явном виде анализируются диффузионные процессы и выделения новых фаз, основанные на диаграмме состояния.

В настоящей работе предложена модель реакционного спекания (сопровождающегося формированием многофазного композиционного материала) в условиях регулируемого нагрева, учитывающая особенности образования новых фаз в объеме реакционной ячейки. На основе простейшего варианта модели отработан алгоритм взаимодействия двух уровней – макроскопического (для образца в целом) и мезоскопического (на уровне отдельных частиц, окруженных расплавом). Математическая модель процесса спекания включает уравнения баланса тепла, учитывающего внешний нагрев радиацией, суммарное тепло от химических реакций, протекающих в каждой реакционной ячейке; диффузию и химические реакции в ячейках с учетом различия коэффициента диффузии подвижного компонента в фазах. Соотношение между объемами частицы и матрицы в начальный момент времени дает начальный состав прессовки. Число ячеек рассчитывается из соотношения их геометрических размеров и размера прессовки. Процесс характеризуют зависимость температуры образца от времени, распределения концентраций чистых элементов и новой фазы в реакционной ячейке и динамика изменения состава во времени. Средние концентрации рассчитывались интегрированием по реакционным ячейкам. На основе модели спекания композиционного материала в условиях регулируемого нагрева, учитывающей особенности образования новых фаз в объеме реакционной ячейки, изучены закономерности накопления фаз в ячейке и в образце в целом при варьировании размера частиц.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020, проект № 23.2.3.