

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт Физико-технический
Направление подготовки 14.04.02 Ядерные физика и технологии
Кафедра Физико-энергетические установки

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Модель теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем

УДК 544.344.2:546.27:536.46

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0АМ5В	Малик Александр Анатольевич		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ФЭУ	Исаченко Д.С.	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. МЕН ИСГТ	Верховская М.В.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф. ПФ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ФЭУ	Долматов О.Ю.	к.ф.-м.н.		

Томск – 2017 г.

Планируемые результаты обучения

Код результата	Результат обучения
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять глубокие, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания для теоретических и экспериментальных исследований в области использования ядерной энергии, ядерных материалов, систем учета, контроля и физической защиты ядерных материалов, технологий радиационной безопасности, медицинской физики и ядерной медицины, изотопных технологий и материалов в профессиональной деятельности.
P2	Ставить и решать инновационные инженерно-физические задачи, реализовывать проекты в области использования ядерной энергии, ядерных материалов, систем учета, контроля и физической защиты ядерных материалов, технологий радиационной безопасности, медицинской физики и ядерной медицины, изотопных технологий и материалов.
P3	Создавать теоретические, физические и математические модели, описывающие конденсированное состояние вещества, распространение и взаимодействие ионизирующих излучений с веществом и живой материей, физику кинетических явлений, процессы в реакторах, ускорителях, процессы и механизмы переноса радиоактивности в окружающей среде.
P4	Разрабатывать новые алгоритмы и методы: расчета современных физических установок и устройств; исследования изотопных технологий и материалов; измерения характеристик полей ионизирующих излучений; оценки количественных характеристик ядерных материалов; измерения радиоактивности объектов окружающей среды; исследований в радиоэкологии, медицинской физике и ядерной медицине.
P5	Оценивать перспективы развития ядерной отрасли, медицины, анализировать радиационные риски и сценарии потенциально возможных аварий, разрабатывать меры по снижению рисков и обеспечению ядерной и радиационной безопасности руководствуясь законами и нормативными документами, составлять экспертное заключение.
P6	Проектировать и организовывать инновационный бизнес, разрабатывать и внедрять новые виды продукции и технологий, формировать эффективную стратегию и активную политику риск-менеджмента на предприятии, применять методы оценки качества и результативности труда персонала, применять знание основных положений патентного законодательства и авторского права Российской Федерации.
<i>Общекультурные компетенции</i>	
P7	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов инновационной профессиональной деятельности.
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P9	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

Министерство образования и науки Российской Федерации
 федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт: Физико-технический

Направление подготовки (специальность): 14.04.02 Ядерная физика и технологии

Кафедра: Физико-энергетических установок

УТВЕРЖДАЮ:
 Зав. кафедрой ФЭУ
 _____ Долматов О.Ю.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации <small>(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)</small>

Студенту:

Группа	ФИО
0AM5B	Малик Александр Анатольевич

Тема работы:

Модель теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем	
Утверждена приказом директора	16.02.17 №959/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	<ul style="list-style-type: none"> – Результаты лабораторных исследований по синтезу боридов вольфрама; – Численные методы для решения систем дифференциальных уравнений.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке	<ul style="list-style-type: none"> – Аналитический обзор численных методов решения дифференциальных уравнений; – Разработка математической модели теплового состояния для системы вольфрам-бор; – Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных данных с целью верификации математической модели.
Перечень графического материала	<ul style="list-style-type: none"> – Презентация; – Сборочный чертёж.
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Верховская М.В.
Социальная ответственность	Гоголева Т.С.

Иностранный язык	Кабрышева О.П.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
Tungsten-boron system / Система вольфрам-бор	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры ФЭУ	Исаченко Д.С.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM5B	Малик Александр Анатольевич		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0AM5B	Малик Александр Анатольевич

Институт	Физико-технический	Кафедра	ФЭУ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	14.04.02 Ядерные физика и технологии/ Ядерные реакторы и энергетические установки

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статистических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документах
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	Оценочная карта конкурентных технических решений
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	Иерархическая структура работ SWOT-анализ Календарный план-график реализации проекта
3. <i>Оценка ресурсной, финансовой, социальной, бюджетной эффективности научного исследования</i>	Определение ресурсоэффективности проекта

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. *Оценочная карта конкурентных технических решений*
2. *Матрица SWOT*
3. *Иерархическая структура работ*
4. *Календарный план проекта*
5. *Бюджет проекта*
6. *Определение ресурсоэффективности проекта*

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент каф. МЕН ИСГТ	Верховская М.В.	к.экон.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM5B	Малик Александр Анатольевич		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 0AM5B	ФИО Малик Александр Анатольевич
-----------------	------------------------------------

Институт	Физико-технический	Кафедра	ФЭУ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	14.04.02 Ядерные физика и технологии/ Ядерные реакторы и энергетические установки

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<i>1. Описание рабочего места (рабочей зоны) на предмет возникновения:</i>	<ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (микроклимат, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующее излучение); – опасных проявлений факторов производственной среды (электрической, пожарной и взрывной природы).
<i>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i>	<ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность; – пожаровзрывобезопасность; – требования охраны труда при работе на ПЭВМ.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i>	<ul style="list-style-type: none"> – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (коллективные и индивидуальные).
<i>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности:</i>	<ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент каф. ПФ ФТИ	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0AM5B	Малик Александр Анатольевич		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа включает в себя: 138 страниц, 43 рисунка, 21 таблицу, 2 приложения.

Ключевые слова: борид вольфрама, синтез, моделирование физических задач, тепловая модель.

Объектом исследования является тепловое состояние системы вольфрам-бор, получаемое в режиме самораспространяющегося высокотемпературного синтеза.

Цель работы – разработка модели теплового состояния образцов для ядерных установок на основе расчетно-теоретического анализа динамики температурных полей при распространении волны горения.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Разработка численной модели теплового состояния образцов на основе решения нестационарного уравнения теплопроводности с подвижным источником тепловыделения.

2. Определение закономерностей формирования температурных полей в объеме образца при прохождении волны горения.

3. Расчетно-теоретический анализ влияния параметров подготовки шихты борсодержащих материалов на тепловое состояние образцов в процессе их синтеза.

4. Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных данных с целью верификации расчетно-теоретической модели.

Степень внедрения: высокая.

Область применения: ядерные материалы.

Экономическая эффективность/значимость работы: высокая.

Оглавление

Введение.....	11
1 Керамика.....	13
1.1 Виды и классификация керамики.....	13
1.2 Микроструктура и свойства керамики.....	15
2 Формование и спекание керамических продуктов.....	17
2.1 Виды формования.....	17
2.1.1 Холодное прессование в пресс-формах.....	19
2.1.2 Изостатическое прессование.....	23
2.1.3 Литьё под давлением и мундштучное прессование.....	25
2.1.4 Горячее прессование.....	27
3 Физико-химические свойства и методы получения боридов тугоплавких металлов.....	29
3.1 Диаграмма состояния вольфрам-бор.....	29
3.2 Структура боридов вольфрама.....	32
3.3 Свойства боридов вольфрама в сравнении с другими тугоплавкими металлами.....	33
3.4 Химические методы получения боридов вольфрама.....	35
4 Модель теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем.....	37
4.1 Постановка задачи.....	37
4.2 Параметры источника тепловыделения и влияние геометрии образцов на тепловые режимы горения.....	44
4.3 Численная реализация модели синтеза с плоским фронтом распространения волны горения.....	49
4.4 Расчетно-теоретический анализ влияния основных факторов управления СВС-процессом.....	50
4.4.1 Влияние плотности исходной системы на формирование температурных полей при протекании СВС.....	52

4.4.2	Влияние величины энерговыделения, протекающих СВС-реакций, на тепловое состояние системы.....	55
4.4.3	Динамика температурных полей, реализующихся при горении борсодержащих СВС-систем при нагружении реакционно-способными добавками.....	56
4.5	Экспериментальное изучение влияния параметров подготовки и проведения СВ-синтеза на формирование температурных полей.....	61
4.5.1	Приборы и техника проведения эксперимента.....	61
4.5.2	Влияние реакционно-способных добавок на тепловые режимы и свойства конечного продукта.....	64
4.5.3	Сравнительный анализ результатов расчетных и лабораторных экспериментов по синтезу борсодержащих материалов.....	69
5	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	74
5.1	Потенциальные потребители результатов исследования.....	74
5.1.1	Анализ конкурентных технических решений.....	75
5.1.2	SWOT-анализ.....	77
5.2	Планирование управления научно-техническим проектом.....	79
5.2.1	Иерархическая структура работ проекта.....	80
5.2.2	Контрольные события проекта.....	80
5.2.3	План проекта.....	81
5.3	Бюджет научного исследования.....	84
5.3.1	Расчёт материальных затрат.....	84
5.3.2	Расчёт затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ.....	85
5.3.3	Основная заработная плата исполнителей темы.....	86
5.3.4	Отчисления во внебюджетные фонды.....	89
5.3.5	Накладные расходы.....	89
5.3.6	Формирование бюджета затрат исследовательского проекта.....	89
5.4	Организационная структура проекта.....	90
5.5	Матрица ответственности.....	91

5.6 Оценка научно-технического эффекта.....	92
6 Социальная ответственность.....	96
6.1 Анализ опасных и вредных производственных факторов.....	96
6.2 Обоснование и разработка мероприятий по снижению уровней опасного и вредного воздействия и устранению их влияния при работе на ПЭВМ.....	98
6.2.1 Организационные мероприятия.....	98
6.2.2 Технические мероприятия.....	98
6.2.3 Условия безопасной работы.....	101
6.3 Электробезопасность.....	103
6.4 Пожарная и взрывная безопасность.....	104
Заключение.....	107
Список публикаций.....	108
Список использованных источников.....	109
Приложение А.....	114
Приложение Б.....	116

Введение

Развитие атомно- и энергопромышленного комплекса Российской Федерации является одной из самых важных и актуальных задач государства. Для того, чтобы в полной мере удовлетворить свои геополитические интересы, программа Правительства рассматривает перспективу реализации ускоренного развития данной сферы. Основной проблемой являются вопросы, связанные с созданием новых материалов с высокими химическими и физическими характеристиками для ядерных установок различного целевого назначения. Помимо традиционных методов получения материалов также используются и различные виды нетрадиционных способов получения.

Одним из таких методов является самораспространяющийся высокотемпературный синтез (далее СВС), суть которого заключается в способности ряда химических элементов и соединений вступать в экзотермическую реакцию, которая распространяется по объему материала в волновом режиме.

Технология осложняется тем, что вследствие многостадийности фазообразования при прохождении волны горения в структуре материалов происходит образование большого числа фазовых составляющих, что, в свою очередь, приводит к снижению качественных характеристик конечного продукта. Поэтому необходимо уже на начальной стадии проведения СВС рассмотреть формирование температурных полей при распространении волны горения и провести анализ факторов, которые могут повлиять на ее динамику.

Целью работы является разработка модели теплового состояния образцов для ядерных установок на основе расчетно-теоретического анализа динамики температурных полей при распространении волны горения.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Разработка численной модели теплового состояния образцов на основе решения нестационарного уравнения теплопроводности с подвижным источником тепловыделения.

2. Определение закономерностей формирования температурных полей в объеме образца при прохождении волны горения.

3. Расчетно-теоретический анализ влияния параметров подготовки исходной шихты борсодержащих материалов на тепловое состояние образцов в процессе их синтеза.

4. Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных данных с целью верификации расчетно-теоретической модели.

1 Керамика

1.1 Виды и классификация керамики

Керамика – неметаллический поликристаллический материал (обычно получаемый спеканием порошков).

Керамика подразделяется на следующие виды:

- «неметаллическая» – оксиды, карбиды, нитриды и пр.;
- «поликристаллическая» – зерна микронного размера (иначе – область наноматериалов);
- «материал» – наличие связей (перешейков, границ) между зернами, определенные механические свойства (обычно – но не всегда – твердость, хрупкость, достаточно высокая плотность);
- «получаемая спеканием» – спекание лишь один из способов (традиционных), возможно использование кристаллизации, ударного прессования.

К керамике не относятся: прессованные порошки металлов, стекло и аморфные материалы, аэрогели, ситаллы, стекловата, асбесты, монокристаллы, прессованные гранулярные пластмассы.

Классификация по составу:

1. Силикатная керамика

Алюмосиликатная

— $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3$ ($T_{\text{пл}}(\text{SiO}_2) \sim 1715^\circ\text{C}$, ($T_{\text{пл}}(\text{Al}_2\text{O}_3) \sim 2060^\circ\text{C}$, ($T_{\text{пл}}(\text{SiO}_2 - 60\%\text{Al}_2\text{O}_3) \sim 1850^\circ\text{C}$ (муллит), эвтектики муллит – SiO_2 при 1595°C , муллит – Al_2O_3 при 1840°C);

— кремнеземистая (>80% SiO_2), кварцевая (чистый SiO_2), динасовая (добавки оксида кальция, оксидов железа);

— $x\text{SiO}_2 - (1-x)\text{Al}_2\text{O}_3$, увеличенная прочность и термостойкость, огнеупоры, художественная керамика;

— корундовая (>90% Al_2O_3)—высокая плотность вплоть до 1500 °С, предел прочности: сжатие – 4 ГПа, изгиб – 1 ГПа, прозрачный Al_2O_3 (0,2% MgO), тигли, подложки, радиодетали, изоляция, огнеупоры.

Другие оксиды

— кордиеритовая, $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{MgO}$;
— цирконовая, ZrSiO_4 ;
— сподуменовая, $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Li}_2\text{O}$;
— >80% MgO (добавки CaO , Cr_2O_3 , Al_2O_3) – огнеупоры, изоляторы, носители для катализаторов.

2. Огнеупорная керамика

Материалы тиглей

— оксиды – Al_2O_3 , MgO , ZrO_2 (YSZ), BeO , R_2O_3 ($\text{R}=\text{Y}$, Nd , стабилизация спекания 0.5-1% TiO_2);
— сложные системы – BaZrO_3 , (аэрогели).

Тугоплавкая керамика

— нитриды BN , AlN , Si_3N_4 , сиалоны $\text{Si}_3\text{N}_4 + \text{Al}_2\text{O}_3$, Y-Zr-O-N ;
— карбиды Si , Ti , Nb , W .

Температуры плавления, °С:

SiC (~2700), Si_3N_4 (1900), BN (~3000), B_4C (~2350), NbB_2 (2900), HfC (3890), HfN (3305), TaN (3350), TaC (3880), ZrC (3540) – высокая прочность, электро и теплопроводность, огнеупорность, химическая стабильность (без O_2) – конструкционные материалы, огнеупоры, высокотемпературные нагреватели, металлообработка.

3. Магнитная и электротехническая керамика

Оксиды IV и V группы

— TiO_2 , ZrO_2 (YSZ, стабилизация оксидами иттрия или кальция), титанаты, цирконаты, ниобаты, танталлаты Ba , Sr , Pb , K , Na , титанат–цирконат свинца (PZT) – высокая плотность, необходимые диэлектрическая проницаемость и тангенс потерь, пьезоэлектроника и радиотехника, ионная проводимость и датчики кислорода (ZrO_2);

— Al_2O_3 , MgO , SiO_2 – электроизоляция.

Ферриты

— шпинели, ферриты Ni , Co , Mn , Ca , Mg , Zn , Li – магнитопроводы, сердечники, устройства памяти.

Силициды

— MoSi_2 , сопротивление ~ 200 мкОм·см, устойчивость в окислительной атмосфере до 1650 °С – электронагреватели.

Высокотемпературные сверхпроводники

— перовскиты (и структуры срастания) $\text{REEBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ (2212, 2223);

— токовводы, ограничители предельно допустимого тока, сверхпроводящие ленты, соленоиды, магнитная левитация;

— MgB_2 .

4. Ядерные функции

Изоляция

— теплоизоляция – Al_2O_3 , SiO_2 , в плазменной камере – SiC , Si_3N_4 ;

— ограничители плазмы – SiC , Al_2O_3 ;

— окна плазменной камеры – Al_2O_3 , BeO ;

— электроизоляция – Al_2O_3 , MgO , SiO_2 .

Ядерное топливо

— UO_2 , UC , UN , PuO_2 ;

— оболочка тепловыделяющих элементов (ТВЭЛов) – SiC , Si_3N_4 .

Замедление и отражение нейтронов

— замедлители и отражатели нейтронов – BeO , ZrO_2 , Be_2C ;

— нейтронная защита – B_4C , HfO_2 , Sm_2O_3 .

1.2 Микроструктура и свойства керамики

Микроструктура керамики подразделяется на:

— Грубая (5–30 % пор) – строительные материалы, огнеупоры;

- Высокопористая (~ 30% пор) – теплоизоляционные материалы;
- Тонкая керамика (< 5% пор)– художественная (фарфор, фаянс) функциональная (пьезо-, сегнето-, магнитная, термоэлектрическая, сверхпроводящая, изоляционная, оптическая).

Свойства керамики определяются:

- Физическими свойствами кристаллитов;
- Размером и формой (анизотропией и пр.) кристаллитов;
- Природой связи между кристаллитами;
- Присутствием пор, жидких фаз и пр.

Основными преимуществами керамики являются: относительно простые и выгодные методы получения из порошков (спекание), уникальные свойства керамики и керамических композитных материалов.

2 Формование и спекание керамических продуктов

2.1 Виды формования

Основной и главной целью изготовления керамики является – получение механически прочного изделия заданных геометрических размеров за счет предварительного механического компактирования (формования, прессования, шликерного литья) полидисперсного порошка и придания ему определенной формы, а также последующей (высокотемпературной) обработки сформированной заготовки путем спекания, реакционного спекания, микроволновой обработки, кристаллизации из расплава и пр.

Подготовка – подвод механической энергии, создание композиции порошков кристаллитов заданного гранулометрического состава.

Формование – подвод механической энергии, придание формы, формирование пространственного положения кристаллитов для спекания.

Промежуточные стадии – сушка, отжиг органических связующих и др.

Спекание – подвод тепловой энергии, «фиксация» формы, образование перешейков между кристаллитами, рост кристаллитов, уменьшение пористости.

Также одним из важных этапов является подготовка порошков для создания керамики. На рисунке 2.1 представлена одна из простейших схем этапов подготовки порошков.



Рисунок 2.1 – Этапы подготовки порошков

В промышленности для получения порошков используются мельницы следующих типов: турбомельницы, шаровые мельницы, вибромельницы, струйные мельницы. Тогда как для создания порошков в условиях лаборатории применяются: мельницы планетарного типа, дезинтеграторы, криодиспергирование.

Операция формования направлена на придание заготовкам из порошков формы, размеров и механической прочности для обеспечения последующего изготовления изделий, обладающих комплексом заданных функциональных и механических свойств. Обычно это достигается приложением давления к заготовке тем или иным способом. Окончательные свойства получаемых изделий, в основном, зависят от плотности сформованных заготовок и распределения плотности по их объёму. Общая относительная плотность заготовок и характер распределения плотности по объёму определяются рядом факторов:

- Способом формования (прессования);
- Прикладываемым давлением;
- Средним размером зерен или частиц порошка;
- Гранулометрическим составом материала;

- Состоянием поверхности частиц;
- Степенью искажения кристаллической решетки частиц порошка;
- Состоянием поверхности стенок пресс-форм в случае их использования;
- Наличием смазок при формовании в пресс-формах.

К основным видам процессов формования заготовок относятся следующие:

- Прессование на гидравлических или пневматических прессах в пресс-формах;
- Изостатическое прессование (газовое, жидкостное);
- Горячее литьё под давлением из термопластичных шликеров;
- Мундштучное прессование на экструзионных машинах;
- Горячее прессование;
- Взрывное (детонационное) формование;
- Вибрационное уплотнение;
- Формование электромагнитным импульсом.

Остановимся на наиболее часто используемых способах формования заготовок керамических изделий.

2.1.1 Холодное прессование в пресс-формах

Иначе говоря данный метод называют полусухим прессованием, т.к. применяемые пресспорошки представляют собой достаточно сыпучую массу, из которой после смешивания с пластификатором и протирания через сетки для формирования гранул, путем подсушивания удаляют часть растворителя до достижения кондиционных свойств. Иногда применяются с целью получения пресспорошков и такие агрегаты, как устройства для распылительной сушки.

К контролируемым параметрам пресспорошков относятся:

- насыпная масса [г/см³];
- сыпучесть [см³/сек или г/сек];

— влажность или содержание другого удалимого растворителя в процентах или [г/г], [г/см³].

Насыпную массу определяют, засыпая порошок в специальный мерный стаканчик выше его краев и сравнивая поверхность пластиной, после чего проводят взвешивание. Сыпучесть определяется путем измерения скорости прохождения порошком калиброванного отверстия специальной воронки с задвижкой.

Пресс-формы по своей конструкции должны иметь как можно более простую конфигурацию для уменьшения возможных напряжений в сформованных заготовках. Соотношение высоты и поперечного сечения получаемых заготовок чаще не превышает ~ 3:1 – 5:1 с использованием смазок и ~ 2:1 – без них. Высота прессовки ограничена неравномерностью распределения давления в заготовке, трением порошка и пуансонов о стенки пресс-формы. Сами пресс-формы бывают выполнены конструктивно в разборном варианте и неразборном, когда для извлечения заготовки необходимо её выталкивание одним из пуансонов. На рисунке 2.2 приведены схемы одностороннего и двухстороннего прессования заготовок и соответственно распределения давления прессования по высоте засыпки порошка.

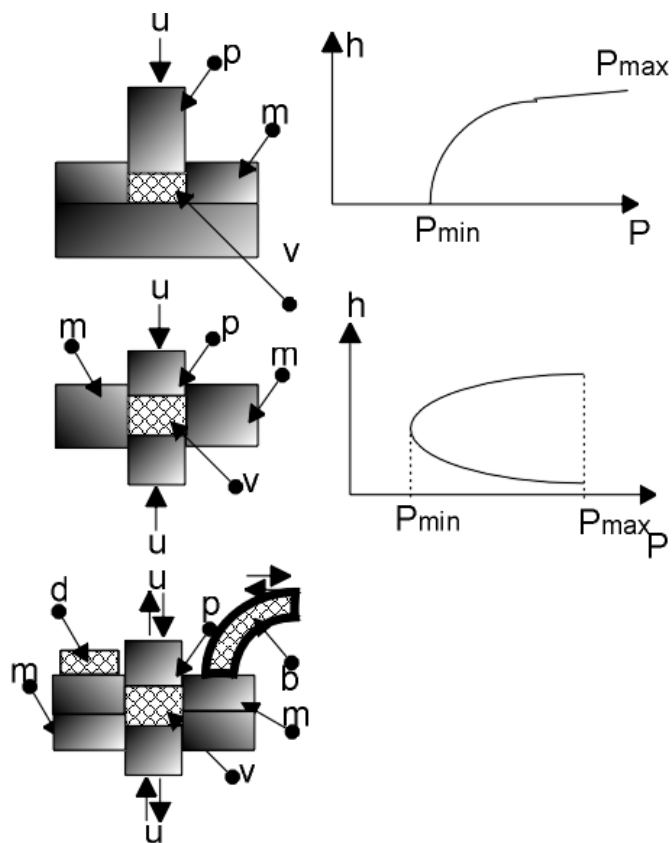


Рисунок 2.2 – Различные варианты прессования

Сверху – прессование с одним пуансоном.

Посередине – прессование с двумя пуансонами.

Внизу – прессование с автоматически заполнением пресс-формы и выталкиванием готовой прессовки.

u – направление усилия; m – матрица пресс формы; p – пуансон; v – прессуемое вещество (порошок); b – бункер-питатель; d – спрессованная деталь.

Частицы порошков при прессовании взаимодействуют между собой различным образом (Рисунок 2.3).

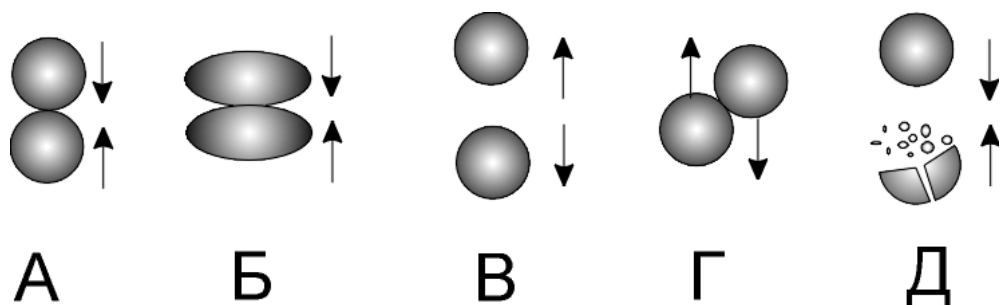


Рисунок 2.3 – Различные типы взаимодействия частиц

- А – контакт без деформации;
- Б – пластическая деформация;
- В – отталкивание (упругое взаимодействие);
- Г – скольжение;
- Д – разрушение (хрупкая деформация).

В ходе прессования с увеличением давления плотность заготовки увеличивается в соответствии с графиком, приведенным на рисунке 2.4. На участке (а) происходит укладка частиц в основном за счет их скольжения и контактов без деформации с разрушением арок и мостиков, образуемых частицами. Участок (б), который не всегда ярко выражен на реальных кривых, характеризуется проявлением упругой деформации (отталкивания). На участке (в) наблюдается хрупкое разрушение или пластическая деформация. После извлечения заготовок происходит некоторое обратное расширение прессовок за счет действия сил упругой деформации частиц, что ведет иногда к дальнейшему возрастанию пористости изделий. Чтобы предотвратить такое явление прибегают к выдержке заготовок при заданном давлении для релаксации напряжений. Ещё одним способом уменьшить пористость полученного после спекания материала является прессование при пониженном давлении или в вакууме, этим самым достигается уменьшение количества захватываемого заготовками воздуха.

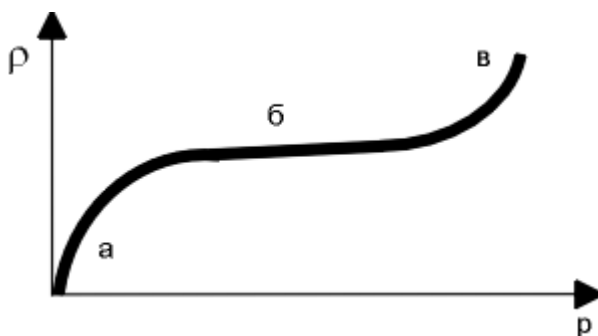


Рисунок 2.4 – Зависимость плотности изделия от давления прессования

Достоинства данного метода формования:

- принципиальная простота реализации;

- возможность автоматизации и механизации с высокой производительностью;
- высокая воспроизводимость размеров заготовок;
- удаление пластификаторов не требует проведения отдельной операции.

Имеются также определенные недостатки:

- неоднородность распределения плотности;
- возможность появления расслоения заготовок за счет их пониженной плотности в центральной части;
- невозможность изготовления изделий высокого класса точности без механической обработки и невозможность получения сложных форм заготовок;
- высокая стоимость пресс-форм.

2.1.2 Изостатическое прессование

Проводится в жидкой (гидростатическое) или газовой (газостатическое) среде. Рабочая среда нагнетается в герметизированную камеру прессования компрессорами и создаёт давление до нескольких тысяч атмосфер. Газостатическое прессование может сочетать высокое давление с повышенной температурой, что позволяет в ряде случаев совместить процесс формования и спекания. Для гидростатического прессования необходимо использование защитных оболочек из резины или другого подходящего материала, изолирующего заготовку от жидкости (минерального масла, спиртоглицериновой смеси и пр.). Порошок после засыпки в оболочки иногда подвергается предварительному вибрационному уплотнению (Рисунок 2.5)

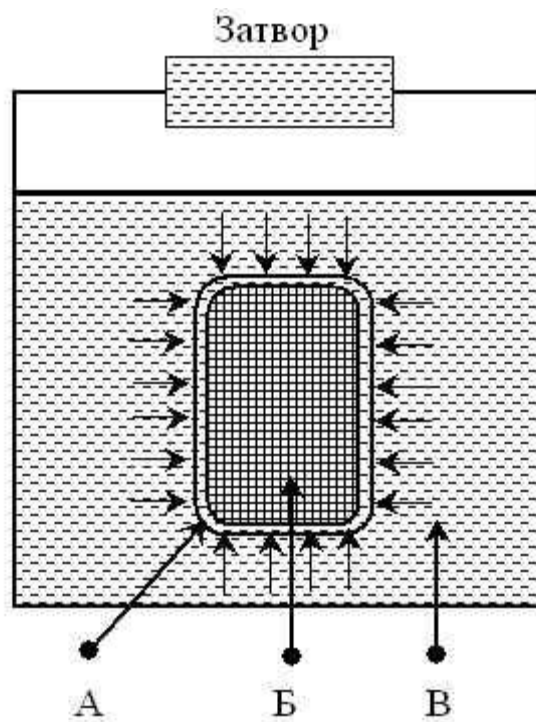


Рисунок 2.5 – Схема изостатического прессования

А – оболочка;

Б – заготовка;

В – рабочая жидкость.

Достоинства метода:

- равномерность распределения давления и плотности в заготовке за счет всестороннего (изостатического) сжатия;
- отсутствие потерь на трение и необходимости в пластификаторах;
- отсутствие коробления при спекании;
- произвольные соотношения высоты и поперечного сечения заготовок.

Недостатки:

- неточность размеров получаемых заготовок;
- шероховатость их поверхности;
- недостаточно высокая производительность оборудования.

К недостаткам можно отнести и весьма высокую стоимость изготовления и эксплуатации высокотемпературных газостатов, применение которых оправдано с экономической точки зрения только для очень

ответственных и дорогостоящих изделий или для материалов, которые не представляется возможным сформовать другими методами.

В некоторых случаях прибегают к приёму изостатической допрессовки заготовок, полученных обычным прессованием, что дает ощутимый эффект повышения их плотности и равномерности её распределения в объёме.

2.1.3 Литьё под давлением и мундштучное прессование

Осуществляется из шликеров, состоящих из формуемого порошка и связки (например, парафина), которая при нагревании расплавляется и придает массе текучесть. Иногда в шликеры входят разные добавки: поверхностно-активные для улучшения физико-химических свойств композиций; добавки, ускоряющие затвердевание заготовки и пр. Различными вариантами указанных методов являются, например, литьё намораживанием, литьё в кокиль (специальная форма с каналами для вытеснения воздуха). Непрерывное литьё в фильеру позволяет получать длинномерные изделия типа лент, а также и более сложных профилей. Имеется возможность формования ленточных заготовок и путем прокатки вальцами размягченного шликера. Плотности заготовок, полученных по данной группе способов, распределены более равномерно, чем при обычном прессовании, хотя усадка в направлении, параллельном направлению литья, и перпендикулярном может быть различной.

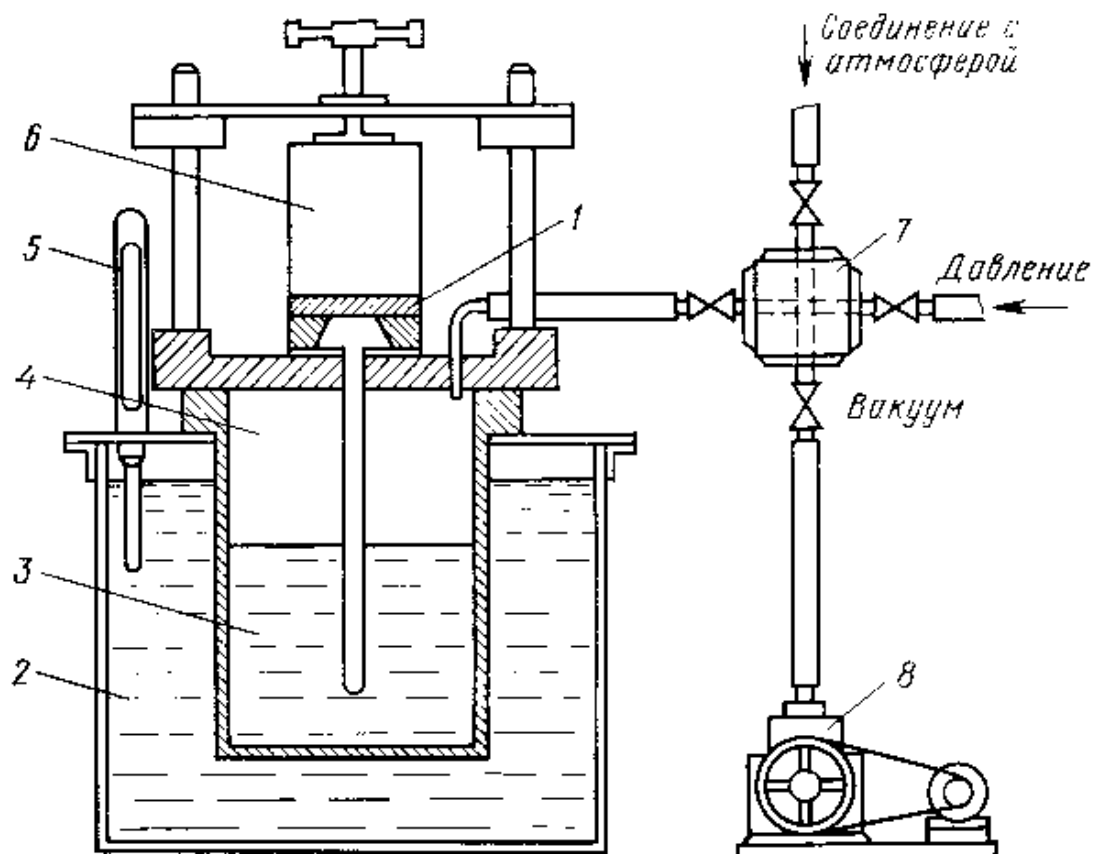


Рисунок 2.6 – Блок-схема установки для формирования ферритовых элементов методом горячего литья под давлением

1 – форма, 2 – термостат, 3 – резервуар, 4 – бачок, 5 – контактный термометр, 6 – прижимное устройство, 7 – редуктор, 8 – вакуумный насос.

Достоинства метода:

- чистота поверхности заготовок;
- достаточно однородное распределение плотности по объёму;
- высокая производительность;
- возможность получения сложных конфигураций;
- отсутствие потерь материалов.

Недостатки шликерных методов:

— необходимость использования значительных количеств пластификаторов;

— наличие отдельной операции удаления связки, которая осуществляется, в частности, путем установки заготовок на пористые

подставки и осторожного нагревания для перевода связки в подвижное состояние, впитывания её подложкой с последующим испарением.

2.1.4 Горячее прессование

В данном случае совмещаются процессы формования и спекания изделий в пресс-формах, нагреваемых до нужной температуры (как правило, - до реализации пластических свойств материалов). Стадийность процессов, происходящих при горячем прессовании, имеется три основных стадии:

1. До 90 % от максимально достижимой плотности реализуется сдвиг и скольжение частиц относительно друг друга;
2. Граничное скольжение частиц и объёмная деформация;
3. Объёмная деформация.

Давление прессования по данному методу составляет обычно 200-400 кГс/см². Примерные режимы и последовательность задания требуемых температур и давлений приведены на рисунке 2.7. При этом время, необходимое собственно для операции спекания, после обычного прессования больше, чем при осуществлении горячего прессования.

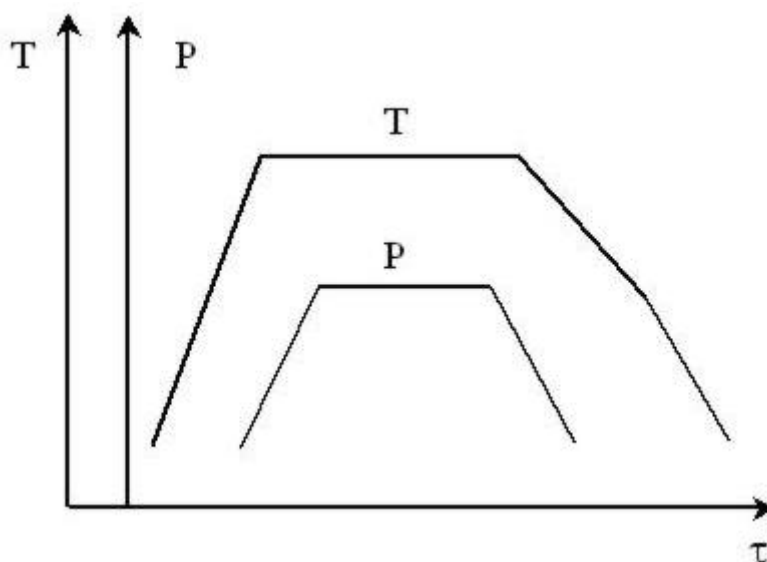


Рисунок 2.7 – Примерные режимы и последовательность задания требуемых температур и давлений

Достоинства метода:

- очень хорошие механические (прочностные) характеристики получаемых изделий;

- минимальные допуски по размерам заготовок;

- относительно невысокие рабочие давления;

- сокращение времени спекания.

Недостатки метода:

- необходимость использования жаропрочных дорогостоящих пресс-форм, их быстрый износ;

- невысокая производительность.

3 Физико-химические свойства и методы получения боридов тугоплавких металлов

3.1 Диаграмма состояния вольфрам-бор

Диаграмма состояния W–B наиболее изученная среди диаграмм переходных металлов с бором (Рисунок 3.1). По данным различных работ, установлено существование по крайней мере шести боридных фаз вольфрама: W_2B , α -WB, β -WB, α - W_2B_5 , β - W_2B_5 , WB_4 .

В работе [6] методов рентгеновского, металлографического анализов и микротвердости была уточнена диаграмма состояния системы W–B. Для этой цели готовились сплавы WB_x , где $x=0,01; 0,02; 0,05; 0,1; 0,2; 0,4; 0,8; 1,0; 1,5; 2,0; 2,5; 3,0$. Таким образом, подтверждено существование в системе W–B боридов W_2B , WB, W_2B_5 и были намечены следующие фазовые области системы W–B (от 1 до 70 – 80 ат.% B):

— α -область ограниченного твердого раствора бора с α -W. Период решетки α -W уменьшается при этом от 3,1495 до 3,313 Å и остается неизменным вплоть до 28,6 ат.%.

— двухфазная область $\alpha+\gamma$; γ – фаза (W_2B) обладает узкой областью гомогенности и твердостью 2420 кГ/мм²;

— двухфазная область $\gamma+\delta$ (W_2B+WB);

— область гомогенности WB (δ -фазы), простирающаяся почти до 50 до 55 ат.% B с твердостью, изменяющейся от 2080 до 3752 кГ/мм²;

— двухфазная область $\delta+\epsilon$ ($WB+W_2B_5$);

— область гомогенности W_2B_5 .

В отличие от данных Кисслинга [7] указывается на довольно широкую область гомогенности борида W_2B_5 (от 68 до 75 ат. % B).

На рентгенограмме образца с содержанием 75,0% B обнаруживается наряду с W_2B_5 линии, принадлежащие бору. В ряде работ [8-10] установлено, что борид вольфрама W_2B_5 образуется не в результате конгруэнтного плавления [11], а по перектической реакции при 2375°C.

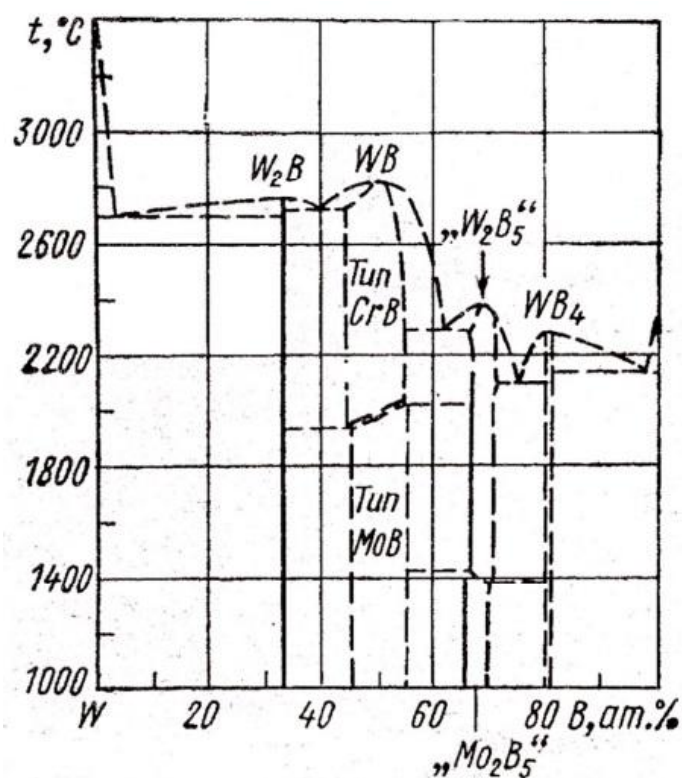


Рисунок 3.1 – Диаграмма состояния вольфрам-бор

Кисслинг получал сплавы вольфрама с бором в широком концентрированном интервале содержаний (до 71,4 ат.%) бора [7]. В работе также получены и идентифицированы три индивидуальных соединения вольфрама с бором состава W_2B (α -фаза), WB (δ -фаза), и W_2B_5 (ϵ -фаза).

Моноборид вольфрама существует в двух модификациях: низкотемпературный α - WB , кристаллизующийся в структурном типе α - MoB , переходит при высоких температурах в структурный тип CrB – β - WB . По данным различных работ, температура перехода с α - $WB \rightarrow \beta$ - WB лежит в интервале 1850-2400 $^\circ\text{C}$ [6, 12-14]. По данным К.И. Портного и др. [8-9], при исследовании диаграммы состояния системы W - B с привлечением комплексных методов анализа (рентгеноструктурного, микроструктурного, локального, рентгеноспектрального, химического и гравиметрического) и с использованием высокочистых бора и вольфрама установлено, что переходы α - $WB \leftrightarrow \beta$ - WB наблюдаются при разных температурах. Фаза α - WB , находящаяся в равновесии с W_2B , переходит в β - WB при температуре более 2300 $^\circ\text{C}$, а находящаяся в образцах в равновесии с W_2B_5 при 2400 $^\circ\text{C}$.

В работе [7] подтверждено существование боридов W_2B , WB , W_2B_5 с гексагональной структурой. Ю.Б.Кузьма и др.[15] в продуктах восстановления двуокиси вольфрама бором в вакууме получили при 900 – 1300°C новое соединение, близкое по составу к W_2B_5 . В работе сделан выбор о том, что существуют две модификации борида W_2B_5 : низкотемпературная фаза α - W_2B_5 , структурный тип Mo_2B_5 и высокотемпературная фаза β - W_2B_5 , собственный структурный тип. Кроме того, показано, что образование α - W_2B_5 идет через стадию образования низкотемпературной модификации WB при её последующем взаимодействии с избытком бора.

В работе [6] борид W_2B_5 с содержанием бора выше 71,4 ат. % описывается формулой $WB_{3,0}$ Романс и Круг [16] уточнили состав этой фазы и приписывают ей формулу $WB_{2,13}$, как описано Кисслингом [7]. По-видимому, в обоих случаях речь идет о бориде вольфрама W_2B_5 в области гомогенности со стороны высоких содержаний бора.

В работе Чретина и Хельгорски [17] впервые указывается на существование борида состава WB_4 который получен спеканием порошков вольфрама и бора при 1000°C. Соединение неустойчиво и при 1600°C разлагается с выделением свободного бора и W_2B_5 по реакции:



Гольдшмидт [18] подтвердил в своей работе существование тетраборида вольфрама. Структура борида WB_4 в упомянутых работах определена как тетрагональная по сходству с порошками борида вольфрама с тетраборидами тория и урана.

Диаграммы состояния $W-B$, описанные выше, несколько различаются в связи с отсутствием единого мнения о структуре высших по содержанию бора боридов вольфрама.

На рисунке показана наиболее достоверная диаграмма состояния системы $W-B$ по данным работы [19].

3.2 Структура боридов вольфрама

Структура W_2B_5 характеризуется наличием двумерных борных ячеек. Структура W_2B_5 является дефектной и отличается от структурного типа AlB_2 видом сеток из атомов бора. Этот тип решетки имеет борид вольфрама идеального состава W_2B_5 . Обнаружена низкотемпературная модификация W_2B_5 (α - W_2B_5) [20] со структурой типа Mo_2B_5 , отличающихся от W_2B_5 характером чередования слоев из атомов металла.

В структуре борида W_2B_5 при исследовании монокристаллов обнаружены дефектные слои. Пустые положения могут быть, вероятно, частично заполнены в кристаллах W_2B_5 , содержащих больше бора.

Для высшего борида WB_4 были высказаны два независимых предположения, согласующиеся в структуре металлических слоев и имеющие расхождения в числе и положении атомов бора, что показывает рисунок 3.2.

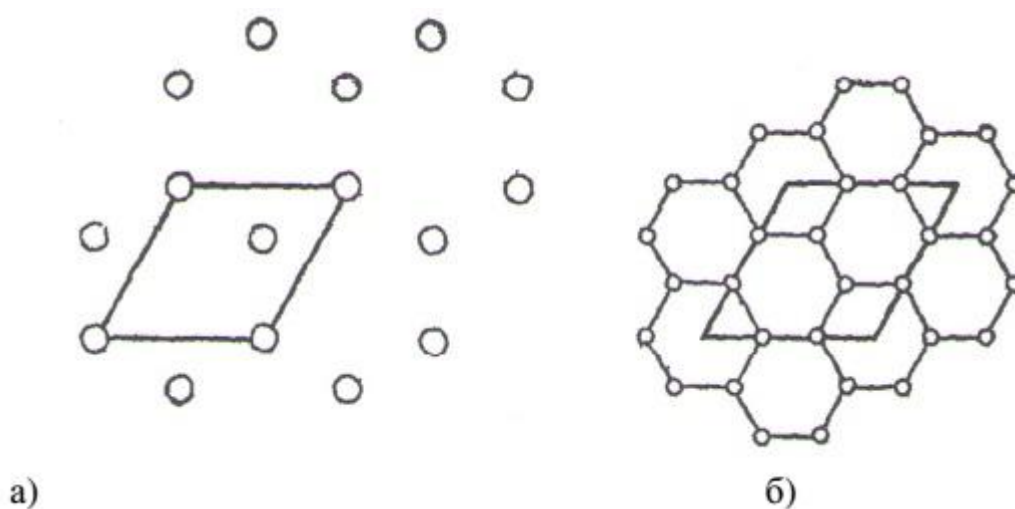


Рисунок 3.2 – Дефектные слои из атомов металла (а) и слои типа Н из атомов бора в кристаллической структуре WB_4 (б), последовательность чередования: АН'В'Н

3.3 Свойства боридов вольфрама в сравнении с другими тугоплавкими металлами

Соединения тугоплавких металлов с бором – бориды относятся к высокотемпературным материалам. По своей кристаллической структуре они являются типичными представителями фаз внедрения.

Наибольшей тугоплавкостью обладают бориды титана, циркония, гафния, ниобия и тантала (Таблица 3.1). Высокотемпературные свойства боридов выше, чем карбидов и нитридов. Изделия из боридов способны выдерживать большие нагрузки в окислительных средах при больших температурах.

Сравнение значений микротвердости боридов вольфрама приводит к следующему выводу: наиболее твердой фазой является моноборид WB, что объясняется образованием атомами бора зигзагообразных цепочек; микротвердость W_2B сравнительно низкая, что связано с изолированным положением атомов бора в ячейке из атомов металла; микротвердость W_2B_5 несколько ниже твердости моноборида WB, что объясняется образованием атомами бора плоских сеток, обуславливающих пониженную прочность к сдвигу. Кроме того, W_2B_5 не является упорядоченной фазой [21], что подтверждается ее способностью образовывать широкие области твердых растворов с другими боридами.

Таблица 3.1 – Сводная таблица свойств боридов тугоплавких металлов

Борид	Температура плавления, К	Микротвердость, кг/мм ²	Термический коэффициент линейного расширения, град·10 ⁶	Теплопроводность, кал/(см·сек·град)	Удельное электросопротивление, мком·см
TiB ₂	3250	3480	8,1	0,063	14,4
ZrB ₂	3310	2200	6,8	0,055	16,6
HfB ₂	3520	2900	5,7	-	8,8
VB ₂	2670	2800	7,5	-	19
NbB ₂	3270	2600	8,1	0,047	34
NB ₂	2550	2200	-	-	64,5
TaB ₂	3370	2500	11,4	0,033	37,4

Продолжение таблицы 3.1 – Сводная таблица свойств боридов тугоплавких металлов

TaB	2700	3130	-	-	100
CrB ₂	2470	1785	11,1	0,053	84
Mo ₂ B ₅	2570	2350	-	0,064	18
W ₂ B ₅	2570	2660	-	0,076	43

О химических свойствах боридов вольфрама сведений в литературе мало. W₂B₅ устойчив в обычных условиях [22], слабо растворяется в соляной, серной, фосфорной и щавелевой кислотах, разлагается почти полностью за 2 часа кипящими азотной, концентрированной серной и хлорной кислотами. Кипящей плавиковой кислотой разлагается лишь на 25% за 2ч, что делает его по сравнению с боридами TiB₂ и CrB₂ более стойким. W₂B₅ устойчив в 5%- и 20%-ных растворах едкого натра [23], добавка перекиси водорода или бромной воды приводит к полному растворению. Окисляться W₂B₅ начинает уже при 800°C, продуктами окисления являются B₂O₃, моноклинная и тетрагональная модификация WO₃.

По абразивной способности WB₄ превосходит борид состава W₂B₅ [24], что делает перспективным использование его в составе абразивных и износостойких материалов. Кроме того, полагают [24], что тетраборид вольфрама может быть использован как поглотитель гамма и нейтронного излучения в ядерной энергетике.

Технически чистый борид вольфрама при длительном хранении на воздухе окисляется, суммарное содержание в нем металла и бора составляет при этом 92-95%. После обработки такого борида 1%-ной щавелевой кислотой химическая стойкость его на воздухе повышается [23].

При нагревании в аргоне наиболее устойчив борид W₂B не теряющий бор даже при нагревании до 2040°C [21]. В присутствии углерода W₂B распадается с образованием WC и WB; в отличие от Mo₂B борид W₂B борокарбида не образует; W₂B с углеродом не взаимодействует [25].

3.4 Химические методы получения боридов вольфрама

При исследовании системы W–B использовались следующие методы получения боридных фаз: сплавление бора и вольфрама в электрической дуге [26], восстановление хлоридов или бромидов вольфрама и бора [27], взаимодействие вольфрама с $\text{BCl}_3 + \text{H}_2$ [28], алюмотермическое восстановление смеси вольфрамового и борного ангидридов, электролиз из ванны состава $2\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{B}_2\text{O}_3 + \text{NaF} + 1/9\text{WO}_3$. Во всех перечисленных случаях рентгенофазовый анализ не давал однозначных результатов. Конечные продукты были загрязнены соосажденным металлом, легкоплавкими шлаками, окисью алюминия.

В работе [24] борид вольфрама WB_4 получали спеканием смеси порошков вольфрама бора в аргоне при 1800°C и методом горячего прессования. Ю.Б.Кузьма и др. [20] получали бориды вольфрама борометрическим методом в вакууме по реакции (3.1):



при $900\text{--}1300^\circ\text{C}$.

Для получения боридов вольфрама кроме описанных способов можно рекомендовать карбидоборный метод [29, 30], восстановление смеси окислов вольфрама и борного ангидрида углем, а также взаимодействие между W, B_4C , B_2O_3 и C. При проведении этих реакций в печи Таммана в токе водорода борид вольфрама содержит до 2 – 3% C.

Лучше использовать для получения боридов вольфрама W_2B_5 вакуумнотермическое восстановление WO_3 по реакции (3.2) [29, 30]:



Для снижения содержания углерода в бориде вольфрама рекомендуется брать в состав шихты 80% сажи расчетного состава, учитывая восстановительное действие окиси углерода в вакуумной печи с графитовым нагревателем. Карбидоборный способ получения боридов вольфрама технической чистоты в условиях, близких к производственным, уже разработан [31]. Исследовано влияние на процесс боридообразования таких

факторов, как температура, время подъема температуры, выдержка, состав газовой среды. Рекомендуется восстановление шихты в электропечи сопротивления с графитовым нагревателем при 1800°C в среде водорода; показана возможность производства борида вольфрама в среде конверсированного газа. Состав борида близок к стехиометрическому, содержание углерода не превышает 0,6%.

В работах [20, 32] для получения боридов вольфрама, не содержащих углерода, рекомендуется боротермическое восстановление двуокиси вольфрама бором в печи с металлическим нагревателем. Этот метод дает возможность получать борид W_2B_5 состава, близкого к стехиометрическому и не загрязненного углеродом, но не находит широкого использования из-за высокой стоимости бора.

Технически наиболее изученным и нашедшим применение в составе керметов [23], также в качестве износостойкого и высокоэффективного наплавочного материала [33, 34] является борид вольфрама W_2B_5 .

Борид вольфрама W_2B_5 в составе наплавочных композиций [34] придает рабочим поверхностям деталей машин и механизмов повышенную износо-, окалино-, и красностойкость. Интенсивность износа образцов, наплавленных композицией с 50% W_2B_5 , в 10-15 раз меньше, чем образцов из эталонной стали У8А.

Борид вольфрама может найти использование при разработке новых материалов для режущих инструментов [35, 36].

При диффузионном насыщении бором поверхности вольфрама [37, 38] образуются высокопрочные боридные покрытия, которые перспективны в новой технике в связи с тем, что у борида вольфрама высокое сечение захвата тепловых нейтронов сочетается с высокой температурой плавления, химической стойкостью и твердостью. Это сочетание свойств открывает пути к использованию таких покрытий в ядерной энергетике [39].

4 Модель теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем

Глава посвящена вопросам создания расчётной математической модели горения двухкомпонентных СВС-систем. Модель направлена на прогнозирование фазового состава конечного продукта и, соответственно, прогнозирование свойств получаемого материала. Для этого необходимо проведение расчетно-теоретического анализа распределения волны горения, возникающей в режиме СВС.

4.1 Постановка задачи

Основной задачей является разработка модели определения теплового состояния образцов в процессе их синтеза при прохождении по объему пространственно-распределенной волны горения.

При движении волны горения в объеме образца происходит трансформация вещества, соответственно, происходит изменение ряда свойств, к которым относятся: плотность, теплоемкость, теплопроводность. Для того, чтобы более точно описать процесс горения требуется условно разделить образец на три зоны, в каждой отдельно определяются физико-химические свойства шихты компонентов. Волна горения представляет собой узкую зону (ширина зоны горения менее 1 мм [40]). В ней происходит процесс синтеза с высоким выделением тепловой энергии. Эта энергия идет на поддержание реакции синтеза и нагрев зоны предварительного нагрева (рисунок 4.1).

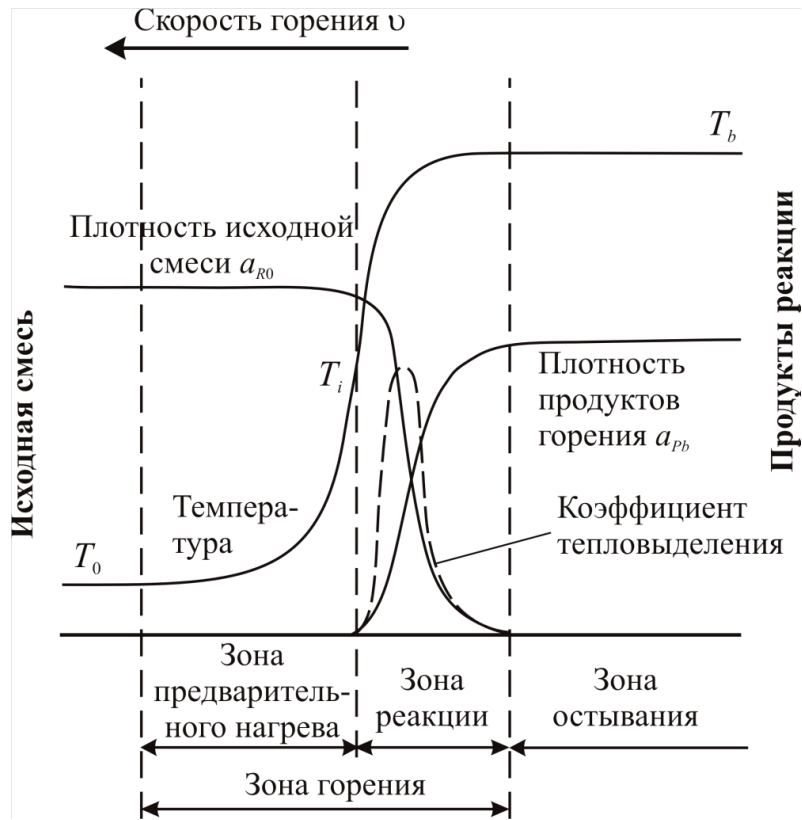


Рисунок 4.1 – Структура и основные характеристики волны горения

Следовательно, для решения поставленной задачи требуется решить уравнение теплопроводности следующего вида:

$$\alpha(T) \cdot \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{q_v}{C(T) \cdot \rho} = \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (4.1)$$

где $\alpha(T)$ — коэффициент температуропроводности;

$C(T)$ — температурная зависимость теплоемкости;

ρ — плотность образца;

q_v — объемный источник тепловыделения.

Уравнение (4.1) представляет собой краевую задачу и для ее решения необходимо задать граничные условия.

$$1. \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = \pm \alpha \cdot (T_{r=R} - T_S) \pm \varepsilon \sigma (T_{r=R}^4 - T_S^4), \quad \lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{r=0} = 0, \quad (4.2)$$

$$2. \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{z=H} = \pm \alpha \cdot (T_{z=H} - T_S) \pm \varepsilon \sigma (T_{z=H}^4 - T_S^4), \quad \lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{z=0} = T_\Gamma, \quad (4.3)$$

где α — коэффициент теплоотдачи;

ε — коэффициент «черноты» поверхности тела;

σ — постоянная Стефана-Больцмана;

T_S — температура среды;

T_T — температура предварительного подогрева образца.

Представленное уравнение (4.1) не имеет аналитического решения, оно существует лишь для некоторых частных случаев. Данное уравнение можно решить численными методами на ЭВМ. Для решения представленного уравнения воспользуемся методом прогонки, который относится к конечно-разностным методам решения краевых задач [41].

Метод конечных разностей является одним из универсальных и широко используемых методов решения краевых задач. Суть метода заключается в том, что область непрерывного изменения аргумента заменяют конечным множеством точек (узлов), называемым сеткой. Вместо функций непрерывного аргумента рассматривают функции, определенные только в узлах сетки, — сеточные функции. Производные, которые входят в дифференциальное уравнение и краевые условия, заменяют их разностными аналогами — линейными комбинациями значений сеточных функций в некоторых узлах сетки. В результате краевую задачу заменяют дискретной краевой задачей, которая представляет собой систему конечного числа линейных и нелинейных алгебраических уравнений. Решение разностной схемы (допускается, что такое решение существует) принимают за приближенное решение краевой задачи.

Рассмотрим трехточечное разностное уравнение [41]:

$$A_i \cdot y_{i-1} - C_i \cdot y_i + B_i \cdot y_{i+1} = -F_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (4.4)$$

с краевыми условиями

$$y_0 = X_1 \cdot y_1 + v_1, \quad y_N = X_2 \cdot y_{N-1} + v_2. \quad (4.5)$$

Здесь $A_i, B_i, C_i, X_1, v_1, X_2, v_2$ — заданные числа.

Решение уравнения (4.4) будем искать в том же виде, в котором заданы краевые условия (4.5), т.е. в виде:

$$y_i = \alpha_{i+1} \cdot y_{i+1} + \beta_{i+1}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1 \quad (4.6)$$

где α_{i+1} и β_{i+1} – неизвестные пока коэффициенты.

Подставляя (4.8) и

$$y_{i-1} = \alpha_i \cdot \alpha_{i+1} \cdot y_{i+1} + \alpha_i \cdot \beta_{i+1} + \beta_i$$

в уравнение (4.6), получим:

$$(\alpha_{i+1} \cdot (\alpha_i \cdot A_i - C_i) + B_i) \cdot y_{i+1} + ((\alpha_i \cdot A_i - C_i) \cdot \beta_{i+1} + \beta_i \cdot A_i + F_i) = 0.$$

Отсюда видно, что уравнение (4.4) будет выполнено, если потребовать

$$\alpha_{i+1} \cdot (\alpha_i \cdot A_i - C_i) + B_i = 0, (\alpha_i \cdot A_i - C_i) \cdot \beta_{i+1} + \beta_i \cdot A_i + F_i = 0.$$

Тем самым получаем рекуррентные соотношения для определения прогоночных коэффициентов α_{i+1} и β_{i+1} :

$$\alpha = \frac{B_i}{C_i - \alpha_i \cdot A_i}, \beta = \frac{(A_i \cdot \beta_i + F_i)}{(C_i - \alpha_i \cdot A_i)}, i = 1, 2, 3, \dots, N-1.$$

Величины α_i и β_i находим из (4.6) и краевого условия (4.5) при $i=0$:

$$\alpha_1 = X_1, \beta_1 = v_1.$$

Значение y_N , необходимое для начала счета по формулам (4.6), получаем из (4.6) и краевого условия (4.5) при $i = N-1$:

$$y_N = \frac{v_2 + X_2 \cdot \beta_N}{1 - X_2 \cdot \alpha_N}.$$

Итак, мы имеем возможность получить точное решение краевой задачи (4.4) – (4.5) при помощи следующего алгоритма:

$$\alpha_{i+1} = \frac{B_i}{C_i - \alpha_i \cdot A_i}, \beta_{i+1} = \frac{(A_i \cdot \beta_i + F_i)}{(C_i - \alpha_i \cdot A_i)}, i = 1, 2, 3, \dots, N-1,$$

$$\alpha_1 = X_1, \beta_1 = v_1,$$

$$y_i = \alpha_{i+1} \cdot y_{i+1} + \beta_{i+1}, i = 0, 1, \dots, N-1, \quad (4.7)$$

$$y_N = \frac{v_2 + X_2 \cdot \beta_N}{1 - X_2 \cdot \alpha_N}.$$

Так как значения y_i находятся здесь последовательно, начиная от правой границы, то формулы (4.7) называют формулами правой прогонки. Аналогично получаются формулы для левой прогонки:

$$\xi_i = \frac{A_i}{C_i - \xi_{i+1} \cdot B_i}, \eta_i = \frac{(B_i \cdot \eta_{i+1} + F_i)}{(C_i - \xi_{i+1} \cdot B_i)}, i = 1, 2, 3, \dots, N-1,$$

$$\xi_N = X_2, \eta_N = v_2,$$

$$y_{i+1} = \xi_{i+1} \cdot y_i + \eta_{i+1}, i = 0, 1, \dots, N-1,$$

$$y_0 = \frac{v_1 + X_1 \cdot \eta_1}{1 - X_2 \cdot \xi_1}.$$

Также возникают моменты, в которых достаточно удобно комбинировать правую и левую прогонки. Прогоночные формулы (4.7) называются устойчивыми, если коэффициенты α_i по модулю не превышают единицы. В этом случае не будут возрастать ошибки округления, которые возникают в процессе счета по рекуррентной формуле (4.6).

Условия

$$A_i > 0, B_i > 0, C_i \geq A_i + B_i, 0 < X_a < 1, a = 1, 2 \quad (4.8)$$

обеспечивают устойчивость прогоночных формул (4.7).

Действительно, $\alpha_1 = X_1 < 1$ и если $0 < \alpha_i < 1$, то

$$0 < \alpha_{i+1} = \frac{B_i}{(C_i - A_i - B_i) + B_i + (1 - \alpha_i) \cdot A_i} < 1.$$

Стоит также отметить, что ограничения на X можно ослабить. Например, прогоночные формулы (4.7) остаются устойчивыми, если вместо (4.8) потребовать выполнения условий

$$A_i > 0, B_i > 0, C_i \geq A_i + B_i, C_i \neq A_i + B_i, 0 < X_a < 1, a = 1, 2 \quad (4.9)$$

или условий

$$A_i > 0, B_i > 0, C_i \geq A_i + B_i, C_i \neq A_i + B_i, 0 < X_a < 1, a = 1, 2, X_1 + X_2 < 2.$$

Исходя из теоретических выкладок представим уравнение теплопроводности (4.1) в следующем виде:

$$a_{i,j} \cdot T_{i-1,j}^{n+1} - c_{i,j} \cdot T_{i,j}^{n+1} + b_{i,j} \cdot T_{i+1,j}^{n+1} = -f_{i,j}, \quad (4.10)$$

где $a_{i,j}$, $b_{i,j}$, $c_{i,j}$, $f_{i,j}$ — коэффициенты уравнения;

$T_{i,j}^n$ — температура на n -ом временном слое.

Представим уравнение (4.1) в конечных разностях, для этого дифференциальные операторы заменим конечно-разностными:

$$\frac{\partial^2 T^{n+1}}{\partial r^2} \approx \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta r^2}, \quad \frac{\partial T^{n+1}}{\partial r} \approx \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1}}{\Delta r},$$

$$\frac{1}{r} \approx \frac{1}{i \cdot \Delta r}, \quad \frac{\partial T}{\partial t} \approx \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t}, \quad \frac{\partial^2 T^{n+1}}{\partial z^2} \approx \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z^2}.$$

Тогда (4.1) для радиального распределения примет вид:

$$\begin{aligned} \frac{a}{\Delta r^2} \cdot T_{i-1,j}^{n+1} - \left(\frac{2a}{\Delta r^2} + \frac{a}{i \cdot \Delta r^2} + \frac{1}{\Delta t} \right) \cdot T_{i,j}^{n+1} + \left(\frac{a}{\Delta r^2} + \frac{a}{i \cdot \Delta r^2} \right) \cdot T_{i+1,j}^{n+1} = \\ = - \left(\frac{1}{\Delta t} \cdot T_{i,j}^n + \frac{1}{2} \cdot \frac{q_v}{C_{i,j}^n \cdot \rho} \right), \end{aligned} \quad (4.11)$$

где индекс i — является номером узла радиуса,

j — номер узла высоты,

n — номер шага интегрирования по времени,

Δr — шаг по радиусу,

Δt — шаг по времени.

Уравнение (4.1) для аксиального распределения температуры примет вид:

$$\frac{a}{\Delta z^2} \cdot T_{i,j-1}^{n+1} - \left(\frac{2a}{\Delta z^2} + \frac{1}{\Delta t} \right) \cdot T_{i,j}^{n+1} + \frac{a}{\Delta z^2} \cdot T_{i,j+1}^{n+1} = - \left(\frac{1}{\Delta t} \cdot T_{i,j}^n + \frac{1}{2} \cdot \frac{q_v}{C_{i,j}^n \cdot \rho} \right), \quad (4.12)$$

где Δz — шаг по аксиальной координате.

Граничные условия (4.4) – (4.5), после замены дифференциальных операторов конечно-разностными, примут вид:

$$\lambda \cdot T_{I,j}^n - \frac{T_{I-1,j}^n}{\Delta r} = -\alpha \cdot (T_{I,j}^n - T_S) - \epsilon \cdot \sigma \cdot (T_{I,j}^{4n} - T_S^4), \quad \lambda \cdot \frac{T_{1,j} - T_{0,j}}{\Delta r} = 0, \quad (4.13)$$

$$\lambda \cdot \frac{T_{i,J}^n - T_{i,J-1}^n}{\Delta z} = -\alpha \cdot (T_{i,J}^n - T_S) - \epsilon \cdot \sigma \cdot (T_{i,J}^{4n} - T_S^4), \quad \lambda \cdot \frac{T_{i,1} - T_{i,0}}{\Delta z} = T_{\Gamma}. \quad (4.14)$$

Сравнивая коэффициенты $a_{i,j}$, $b_{i,j}$, $c_{i,j}$, $f_{i,j}$ уравнений (4.10) и (4.11) с уравнениями граничных условий (4.13) и (4.14), получаем следующие значения:

$$a_i = \frac{a}{\Delta r^2}, b_i = \frac{a}{\Delta r^2} + \frac{a}{i \cdot \Delta r^2},$$

$$c_i = \frac{2a}{\Delta r^2} + \frac{a}{i \cdot \Delta r^2} + \frac{1}{\Delta t}, f_{i,j} = \frac{1}{\Delta t} T_{i,j}^n + \frac{q_v}{2 \cdot C_{i,j} \cdot \rho}. \quad (4.15)$$

В свою очередь коэффициенты для (4.13) будут принимать значения:

$$a_i = \frac{a}{\Delta z^2}, b_i = \frac{a}{\Delta z^2},$$

$$c_i = \frac{2a}{\Delta z^2} + \frac{1}{\Delta t}, f_{i,j} = \frac{1}{\Delta t} T_{i,j}^n + \frac{q_v}{2 \cdot C_{i,j} \cdot \rho}. \quad (4.16)$$

Решение данного уравнения разбивается на два этапа: прямой и обратный. При прямом проходе определяются коэффициенты уравнения $a_{i,j}$, $b_{i,j}$, $c_{i,j}$, $f_{i,j}$ и прогоночные коэффициенты $\alpha_{i,j}$, $\beta_{i,j}$ вычисляемые по следующим рекуррентным соотношениям:

$$\alpha_{i+1,j} = \frac{b_{i,j}}{c_{i,j} - a_{i,j} \cdot \alpha_{i,j}}, \quad \beta_{i+1,j} = \frac{a_{i,j} \cdot \beta_{i,j} + f_{i,j}}{c_{i,j} - a_{i,j} \cdot \alpha_{i,j}}. \quad (4.17)$$

Затем полагают, что

$$T_{i,j}^n = \frac{\mu_2 + X_2 \cdot \beta_{i,j}}{1 - \alpha_{i,j} \cdot X_2}. \quad (4.18)$$

После чего, помощью метода обратного хода, находят распределение температуры в неизвестных узлах сетки, используя значение температуры на предыдущем шаге:

$$T_{i,j}^n = \alpha_{i,j} \cdot T_{i+1,j}^n + \beta_{i+1,j}. \quad (4.19)$$

Из граничных условий (4.13) получаем значения коэффициентов μ_1 , X_1 , μ_2 , X_2 для выражения (4.11):

$$X_1 = 1, \mu_1 = 0, X_2 = 1, \mu_2 = \frac{\Delta r}{\lambda} \cdot \left[- (T_{I,j}^n - T_S) - \epsilon \cdot \sigma \cdot (T_{I,j}^{4n} - T_S^4) \right] \quad (4.20)$$

Для выражения (4.12), применяя граничные условия (4.14):

$$X_1 = 1, \mu_1 = \frac{\Delta z}{\lambda} T_{CP}, X_2 = 1, \mu_2 = \frac{\Delta r}{\lambda} \cdot \left[- (T_{I,j}^n - T_S) - \epsilon \cdot \sigma \cdot (T_{I,j}^{4n} - T_S^4) \right] \quad (4.21)$$

Таким образом, применяя выражения (4.11) — (4.21), определяют значения температур по объему образца.

4.2 Параметры источника тепловыделения и влияние геометрии образцов на тепловые режимы горения

При движении волны горения возникает область с большим энерговыделением, которое расходуется на поддержание реакции синтеза и нагрев следующего слоя. Исходя из этого следует задавать объемный источник тепловыделения как функцию нескольких параметров: радиуса, высоты и времени $q_v(r, z, t)$.

Для моделирования волны горения используется методика, в основе которой лежит перемещение слоя с некоторой скоростью и во времени, в котором происходит тепловыделение Q . Величина тепловыделения определяется следующим соотношением:

$$Q = \frac{W \cdot \rho \cdot v}{\Delta z \cdot n}, \text{ Вт/м}^3 \quad (4.22)$$

где W , Дж/кг – энергетический выход химической реакции; ρ , кг/м³ – реальная плотность образца; v , м/с – скорость распространения волны; n – ширина зоны горения; Δz , м – толщина волны горения.

В ходе работы была разработана методика послойного горения, базирующаяся на результатах приборного эксперимента. В результате экспериментов было выявлено, что возможны два случая распространения волны горения по объему образца (рисунок 4.2). «Геометрия горения» при идентичных условиях теплообмена на свободных поверхностях определяется

значением масштабного параметра H/D , где H – высота образца, мм; D – диаметр образца, мм [42].

Рассмотрим более подробно экспериментальное определение влияние геометрии образцов на тепловые режимы горения.

Одним из самых важных факторов является способ инициации процесса СВС, который заключается в подводе некоторого количества тепла к синтезируемому образцу.

Существуют различные способы инициации СВС, которые можно свести к двум основным механизмам: локальная инициация и подвод тепла ко всей поверхности образца. Конечные свойства продукта непосредственно зависят от механизма инициации реакции. Эти свойства определяются процессами структурообразования, которые протекают в образцах во время синтеза.

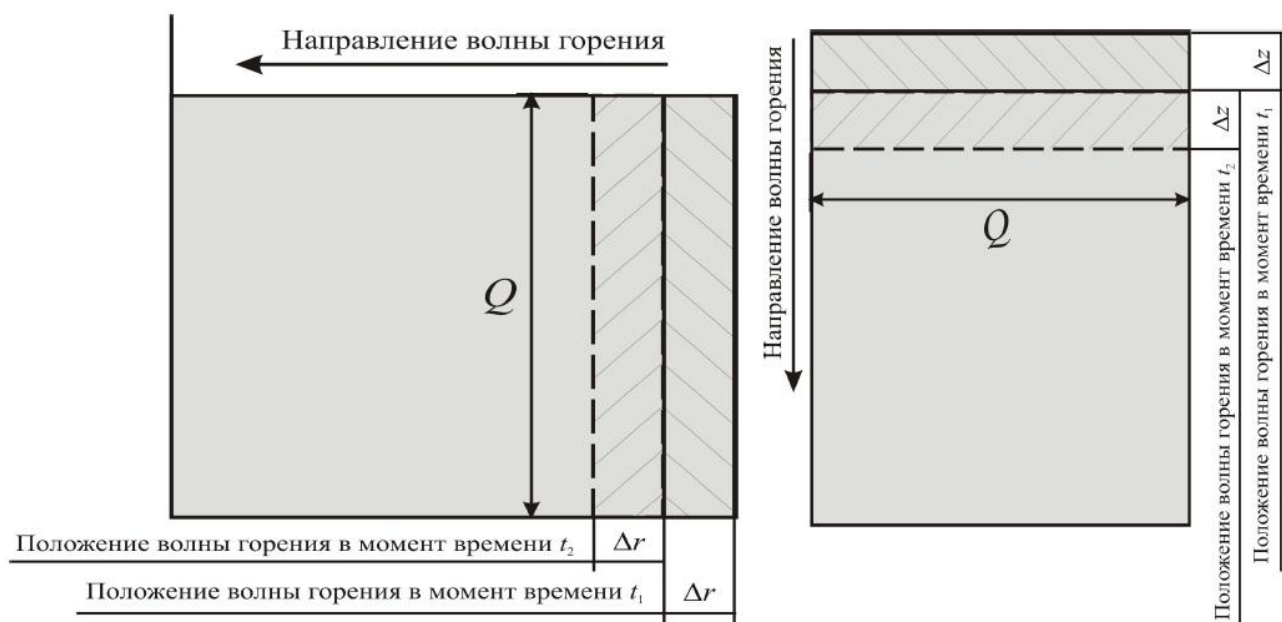


Рисунок 4.2 – Возможные направления волны горения по образцу: а – распространение от периферии к центру (горение по радиусу); б – распространение сверху вниз (горение по высоте).

При синтезе материалов с использованием поджигающей спирали режимы распространения волны горения зависят от места запрессовки запальной спирали. Волна горения начинает распространяться по объему образца от места нахождения спирали. Примеры инициации и распространения

реакции синтеза приведены на рисунке 4.2. При инициации синтеза с боковой поверхности (рисунке 4.2, а) волна горения будет распространяться в продольном направлении, при инициации на верхней поверхности (рисунке 4.2, б) волна пойдет сверху вниз и при запрессовке спирали в объеме образца, возможно, горение будет распространяться равномерно (от спирали к периферии). Следует отметить, что размеры образца не оказывают существенного влияния на направление распространения волны горения.

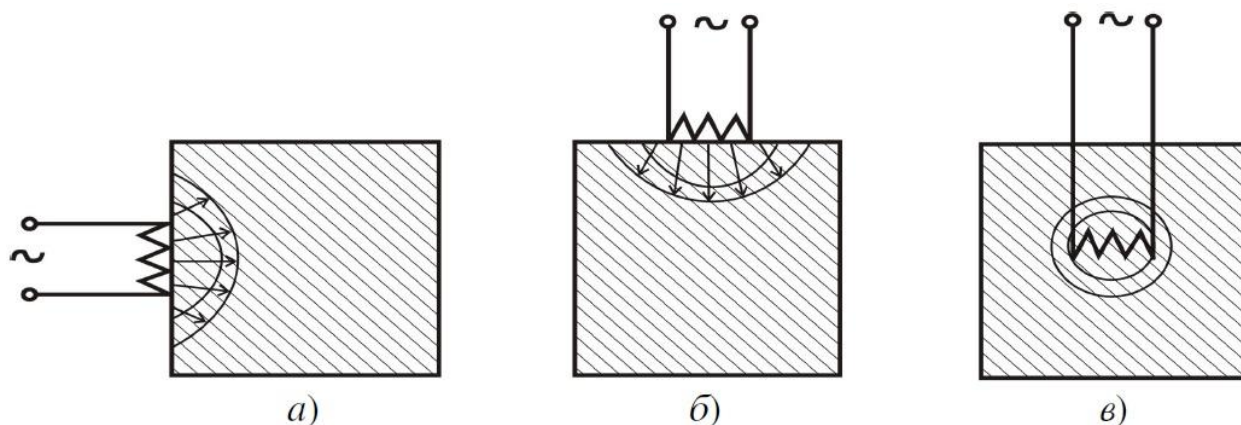


Рисунок 4.3 – Схема инициации процесса синтеза в зависимости от расположения поджигающей спирали

Важной особенностью локальной инициации процесса СВС является то, что значения градиента температур при прохождении волны горения по объему образца достигают очень больших величин. В свою очередь температурный градиент оказывает сильное влияние на структурообразование конечного продукта, что связано с процессами массопереноса вещества, проходящего в объеме образца во время синтеза. Таким образом, наличие больших температурных градиентов при локальной инициации может приводить к образованию сильно неоднородной структуры синтезируемого материала [43].

С другой стороны, к материалам ядерной техники предъявляются жесткие требования по многим параметрам, в том числе необходимость обеспечения однородной структуры. Для того чтобы структура синтезированного образца была максимально равномерна по всему объему, необходимо создать такие условия, при которых значения градиента температур в образце были минимальными [44]. Этого можно достичь,

используя другой механизм инициации СВС - подвод «запального» тепла ко всей поверхности образца. Данный механизм, как правило, реализуется посредством нагревания образца в печи. В данном случае образец предварительно нагревается до некоторой температуры, затем происходит инициация синтеза. Так как образец предварительно нагрет, то градиент температур, развивающийся при синтезе, не имеет больших значений, а значит, конечный продукт должен иметь однородную структуру.

В этом случае одним из основных факторов, определяющих режимы распространения волны горения, является геометрия образца, прежде всего его размеры [44]. А геометрические размеры оказывают влияние на режим горения образца, в первую очередь на скорость и на направление распространения волны горения, а как следствие, и на структурообразование образца.

В проведенных лабораторных исследованиях геометрия образца определяет режимы распространения волны горения следующим образом:

1. Горение инициируется на боковой поверхности, охватывая образец по всей окружности, затем фронт волны в виде сужающегося кольца двигался к центру цилиндрической таблетки. В итоге фронт «схлопывался» в центре, после этого горение прекращалось (кольцевой режим распространения волны горения);

2. Горение инициируется на торцах образца. На верхнем торце образца образовывался плоский слой горения, который двигался вниз. Примерно в десяти из двадцати случаев инициировалось два плоских фронта один сверху, другой снизу, которые двигались навстречу друг другу. Движение встречных фронтов проходило до тех пор, пока они не встречались, затем горение прекращалось (плоский режим распространения волны горения).

С целью определения влияния геометрии на режимы горения систем на основе карбида бора и боридов вольфрама были проведены серии экспериментов, в которых температура предварительного подогрева была одинаковой.

Порошки бора и углерода, порошки вольфрама и углерода прессовали в образцы цилиндрической формы диаметром 30 мм, меняя высоту образца от 4,5 мм до 60 мм с шагом 4,5 мм, для каждого значения шага была проведена серия из 20 экспериментов [45].

В таблице 4.1 приведены результаты экспериментов для образцов карбида бора.

Таблица 4.1 – Реализующийся режим горения в зависимости от геометрии образцов

Высота образца (H), мм	Отношение высоты образца к его диаметру, H/D	Наблюдаемый режим горения
4,5	0,15	Кольцевой
9,0	0,30	Кольцевой
13,5	0,45	Кольцевой
18,0	0,60	Нет определенности
22,5	0,75	Нет определенности
27,0	0,90	Нет определенности
31,5	1,05	Нет определенности
36,0	1,20	Плоский
40,5	1,35	Плоский
...
60	2	Плоский

Аналогичная закономерность была обнаружена и для образцов прессованных из порошков вольфрама и бора.

Анализ полученных результатов показал, что в качестве критерия реализации того или иного режима распространения волны горения может быть использована величина H / D , где H – высота образца, D – диаметр образца. Было установлено [46], что:

1. При $H/D < 0,5$ реализуется кольцевой фронт волны горения.
2. При $H/D > 1$ реализуется плоский фронт волны горения.
3. При $0,5 < H/D < 1$ нет определенности в «геометрии горения», горение может инициироваться как на торцах, так и на боковой поверхности одновременно.

Для первого и второго случая отмечалось равномерное прохождение волны горения по образцу, в третьем случае движение носило хаотичный характер, что отрицательно сказывается на однородности структуры синтезированного образца.

В численных экспериментах все поверхности изначально «холодного» образца цилиндрической формы нагревались излучением и конвекцией горячей окружающей среды. Динамика температурного поля $T(z, r, t)$ позволяла определить те ячейки расчетного поля, в которых удельная внутренняя энергия в определенный момент времени достигала своего предельного значения. При его превышении в данных ячейках имели место условия инициации реакции синтеза. В одних случаях это были ячейки, прилегающие к торцам образца, в других — ячейки, прилегающие к боковой (цилиндрической) поверхности.

4.3 Численная реализация модели синтеза с плоским фронтом распространения волны горения

В случае $H/D > 1$ применяется схема с плоским фронтом горения, распространяющимся сверху вниз (рисунок 4.2, б). Для реализации данной схемы была разработана следующая методика. По высоте весь образец разбивается на конечное число равных участков, общее число участков равно J , а текущий номер участка соответственно равен j . Тогда в начальный момент времени получим следующее значение для объемного тепловыделения:

$$\begin{aligned} q_j^0 &= Q, J - MF \leq j < J \\ q_j^0 &= 0, 0 \leq j < J - MF \end{aligned} \quad (4.23)$$

где MF – количество узлов, которое занимает волна горения.

Для реализации движения волны горения введем переменную MS , определяемую следующим выражением:

$$MS = \text{integer} \left(\frac{v \cdot n \cdot \Delta t}{\Delta z} \right),$$

где n – номер временного слоя, Δt – шаг по времени, Δz – шаг по высоте.

Тогда с учетом введенной переменной на последующих временных слоях объемное тепловыделение будет задаваться следующим выражением:

$$q_j^n = Q, J - MF - MS \leq j \leq J - MS$$
$$q_j^n = 0, 0 \leq j < J - MF - MS, J - MS < j \leq J. \quad (4.24)$$

Предложенная методика решения уравнения теплопроводности с подвижным пространственно-распределенным источником тепловыделения применительно к модели послойного горения, с горизонтально распространяющейся волной, позволяет определить значения температур, возникающих в волне горения, распределения полей температур в зонах предварительного подогрева и остывания и тем самым дает возможность предсказывать возможный фазовый состав конечного продукта, его физические и химические свойства и др.

Таким образом, применение данной методики расчета в совокупности с решением уравнения теплопроводности (4.1), дает возможность определять распределение поля температур в зоне горения, представляющей собой зону реакции и зону предварительного нагрева и зоне остывания.

4.4 Расчетно-теоретический анализ влияния основных факторов управления СВС-процессом

При рассмотрении СВС как направленного синтеза, важным является определение факторов, обуславливающих формирование того или иного температурного поля, т.е. управление процессом горения.

Известно несколько путей управления самораспространяющимся высокотемпературным синтезом, которые следует рассматривать применительно к конкретным его стадиям и изменяемым параметрам. Основными стадиями СВС принято считать подготовку исходной шихты, синтез в режиме самораспространения и стадию охлаждения продуктов горения, включая догорание. К изменяемым параметрам СВС можно отнести химический состав, стехиометрическое соотношение компонентов и

распределение частиц по размерам исходных реагентов, плотность исходной шихты, начальные размеры образцов, начальную температуру, начальное давление [47].

Выделяются следующие типы управления процессом СВС [47]:

1. Управление на стадии подготовки шихты включает в себя правильный выбор химических реагентов (изменение соотношения между содержанием окислителей и восстановителей, изменение степени разбавления шихты конечным продуктом или инертным компонентом), изменение плотности исходного образца, варьирование начальных размеров образца и т.п. Все это может сильно повлиять на термокинетические характеристики процесса и, соответственно, на фазовый состав конечных продуктов. Достоинства этих методов на данной стадии СВС состоят в простоте изменения параметров, а недостатки состоят в трудностях прогнозирования результата и, соответственно, в длительности процесса подбора упомянутых параметров.

2. Управление при проведении процесса, включающее в себя термический подогрев системы. Это, в принципе, также влияет на фазовые и структурные превращения, приводящие к формированию структуры конечных продуктов (что особенно важно для получения продуктов высокой однородности и чистоты, а также фаз высокого давления).

3. Управление при охлаждении готовых продуктов, состоящее в изменении температурного режима охлаждения и типа используемой атмосферы (что особенно важно для стадии дореагирования). Достоинства состоят в возможности точной регулировки изменяемых параметров, к недостаткам относятся трудности контроля результатов воздействия без обязательного количественного анализа СВС-продуктов.

Универсальных методов управления СВС-процессами, пригодных для применения на его различных стадиях, не существует [47]. Более того, высокие значения температуры и скорости горения, а также малые времена синтеза создают существенные трудности для прецизионного управления СВ-синтезом.

Поэтому важное место занимают методы управления, связанные с воздействием на исходный образец.

Рассмотрим наиболее часто применяемый способ управления — управление на стадии подготовки исходной шихты. В этом случае для двухкомпонентных СВС-систем основными параметрами, влияющими на протекание СВ-синтеза являются следующие:

- плотность исходного образца, связанная с величиной давления предварительного прессования;
- энергетический выход протекающих в системе СВС – реакций, связанный с элементным составом исходной системы;
- температура предварительного подогрева исходного образца, обуславливающая начальную температуру процесса.

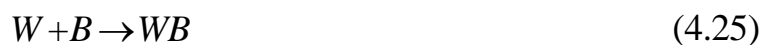
4.4.1 Влияние плотности исходной системы на формирование температурных полей при протекании СВС

В численных экспериментах по определению влияния плотности образцов на формирование температурных полей в процессе синтеза материалов на основе борида вольфрама использовались следующие исходные данные:

Таблица 4.2 – Исходные данные

Параметр	Значение
Скорость реакции горения, мм/с	10
Радиус образца, мм	15
Высота образца, мм	40
Параметр Н / D	1,33
Энергия реакции, кДж/кг	364
Температура предварительного подогрева, К	750
Плотность прессования, кг/м ³	1200 — 10000

Поскольку геометрический параметр $H/D = 1,33$, то рассматривается послойное горение. Расчет синтеза проводился для случая протекания следующей реакции:



На рисунках 4.4 — 4.5 представлены расчетные зависимости температуры, развиваемой в процессе синтеза, от плотности исходных образцов в начальный (рисунок 4.4) и конечный (рисунок 4.5) моменты времени синтеза для системы на основе W-B (реакция 4.25). Горизонтальной чертой отмечена температура процесса горения для борида вольфрама.

На представленных распределениях видно, что температура процесса зависит от плотности исходной шихты компонентов. Также видно, что с увеличением плотности фронт волны горения имеет ярко выраженную форму с мгновенно возрастающей максимальной температурой процесса.

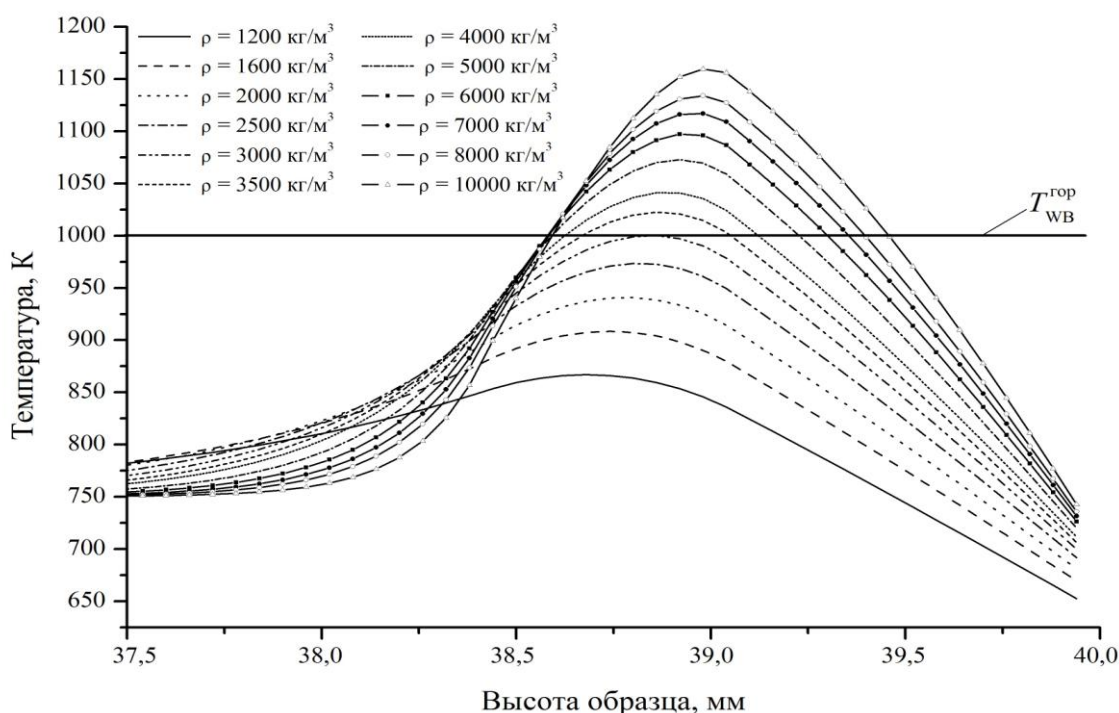


Рисунок 4.4 – Распределение температуры по высоте образца для различных плотностей прессования в момент времени 0,2 с после инициации реакции синтеза (4.25)

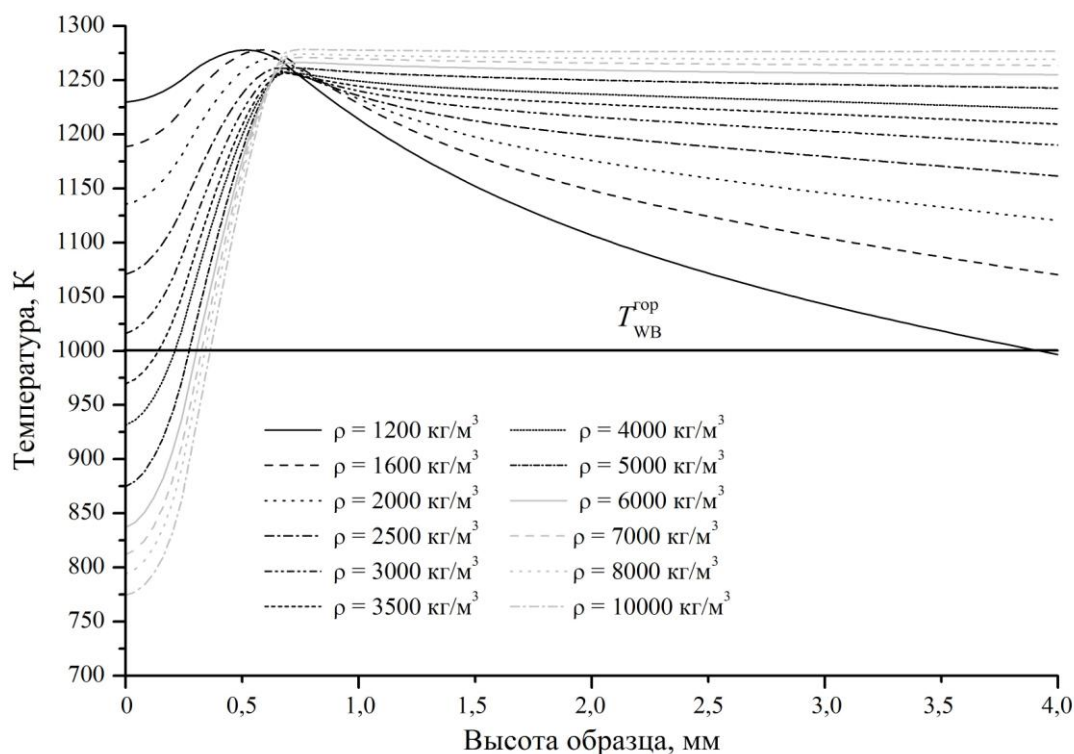


Рисунок 4.5 – Распределение температуры по высоте образца для различных плотностей прессования в момент времени 3,8 с после инициации реакции синтеза (4.25)

При этом можно выделить следующее:

1. При малых величинах плотности образцов $1200 — 2500 \text{ кг/м}^3$ температуры, развиваемые в процессе синтеза в начальный момент времени, меньше, чем установленные значения температур инициации процесса СВС в системе вольфрамбор (температура инициации реакции синтеза: $1000 — 1150 \text{ К}$). В конечный момент времени при указанных значениях плотностей, температура сравнима и даже превышает температуры, развиваемые при синтезе образцов с более значительной плотностью. Кроме того, имеются значительные перепады по объему образца. Также в конечный момент времени наблюдается значительный спад температуры в зоне остывания, это обусловлено установленным в ходе расчетов превышением теплотерь над величиной энергии реакции. Таким образом, можно предположить, что при плотностях системы на основе WB, лежащих в диапазоне $1200 — 2500 \text{ кг/м}^3$, СВС протекать не будет.

2. Начиная с плотностей 5000 кг/м^3 изменение температуры синтеза не значительно. Начиная со значений плотности 5000 кг/м^3 при увеличении с шагом 1000 кг/м^3 , температура увеличивалась на 25 К . Следовательно, можно предположить, что дальнейшее увеличение плотности не приводит к росту температуры процесса, а значит к изменению фазового состава конечного продукта и, следовательно, свойств получаемого материала.

4.4.2 Влияние величины энерговыделения, протекающих СВС-реакций, на тепловое состояние системы

Синтез материалов с заданным сочетанием свойств требует использования таких методов управления СВС, которые позволяли бы получить в структуре материала требуемый фазовый состав. Ситуация осложняется многостадийностью образования конечного продукта в процессе СВС, когда протеканию каждой стадии соответствует свой температурный режим. Так, например, при синтезе материала на основе боридов вольфрама в исходной системе могут образовываться следующие фазовые составляющие:

- WB – при $T = 1600 — 2400 \text{ К}$;
- W_2B_5 – при $T = 900 — 1300 \text{ К}$;
- WB_2 – при $T = 600 — 900 \text{ К}$.

Поэтому для получения в структуре материала тех или иных фаз требуется изменение величины энерговыделения, имеющего место при распространении волны горения. Одним из путей реализации указанного метода управления СВС процессом является введение в исходную шихту реагентов в небольшом количестве дополнительных компонентов:

- способных вступать между собой в экзотермические реакции для увеличения энерговыделения при протекании СВС-процесса (реакционно-способные добавки);
- являющихся либо инертными с точки зрения участия в процессе СВС, либо способных вступать между собой в эндотермические реакции для

уменьшения энерговыделения при протекании СВС процесса (инертные добавки).

В настоящей главе на основе методики определения теплового состояния образцов в процессе СВС рассмотрено влияние величины энерговыделения на формирование температурных полей в структуре образца на примере СВС материала на основе борида вольфрама (реакция 4.25).

4.4.3 Динамика температурных полей, реализующихся при горении борсодержащих СВС-систем при нагружении реакционно-способными добавками

Основной причиной многофазности продуктов синтеза является многостадийность процессов СВС, когда образованию промежуточных продуктов соответствует свой температурный режим. В этом случае вследствие быстроты прохождения волны горения, а, следовательно, и неравномерности нагрева образца по объему, в структуре материала образуются локальные области, где образование конечного продукта остается на той или иной стадии.

Выходом из создавшейся ситуации могло бы стать увеличение суммарного теплового эффекта протекающих в системе реакций. Это означает, что нужно увеличить температуру процесса настолько, чтобы температурные режимы по всему объему образца позволяли бы полностью завершить СВС.

Одним из решений данной проблемы могло бы стать введение исходную шихту реагентов стехиометрических реакционно-способных добавок, которые в процессе протекания синтеза вступают между собой в экзотермическую реакцию, тем самым повышая суммарный тепловой эффект протекания СВС.

В качестве возможных добавок рассматриваются реакционно-способные стехиометрические смеси никеля-алюминия, горение которых может приводить к осуществлению следующих реакций:



Данные системы характеризуются сравнительно малой температурой плавления основных продуктов при сравнительно большом тепловом эффекте реакции горения.

В таблице 4.3 приведены основные характеристики горения рассматриваемых систем [48]:

Таблица 4.3 – Основные характеристики горения исследуемых систем

Концентрация компонентов, мас. %	Преобладающие реакции	Тепловой эффект реакции, кДж/кг	Температура плавления, К
Ni — 86,5; Al — 13,5	$3Ni + Al \rightarrow Ni_3Al$	756	1668
Ni — 68,5; Al — 31,5	$Ni + Al \rightarrow NiAl$	1367	1911
Ni — 57,5; Al — 42,5	$2Ni + 3Al \rightarrow Ni_2Al_3$	857	1405
Ni — 80; Al — 20	$4Ni + 2Al \rightarrow Ni_3Al + NiAl$	936	$Ni_3Al - 1668$ $NiAl - 1911$
Ni — 57,9; Al — 42,1	$Ni + 3Al \rightarrow NiAl_3$	815	1127

Для расчетного определения влияния источника энерговыделения на протекание реакции (4.25) использовались следующие исходные данные:

Таблица 4.4 – Исходные данные

Параметр	Значение
Скорость реакции горения, мм/с	10
Радиус образца, мм	15
Высота образца, мм	40
Параметр H / D	1,33
Температура окружающей среды, К	300
Начальная температура процесса, К	750
Плотность прессования, кг/м ³	5000

В численных экспериментах варьировалась величина энерговыделения, что соответствует изменению количества реакционно-способной никель-алюминиевой добавки.

Для определения процентного содержания реакционно-способной

добавки используется следующее соотношение:

$$\frac{V_{NiAl}}{V_{TB}} = \frac{Q - Q_P}{Q_{NiAl} - Q_P},$$

где Q — суммарный тепловой эффект реакции,

Q_P — тепловой эффект реакции без учета добавки,

Q_{NiAl} — тепловой эффект реакции для $NiAl$,

V_{TB} — объем таблетки,

V_{NiAl} — объем, занимаемый добавкой.

Вариация в ходе расчетного эксперимента величины Q соответствует изменению количества реакционно-способной никель-алюминиевой добавки.

В численных экспериментах моделировалось влияние следующих количеств реакционно-способных добавок:

- 0% вес. $NiAl$, что соответствует величине температурного эффекта реакции (4.25);
- 5% вес. $NiAl$, что соответствует величине температурного эффекта реакции 620 кДж/кг;
- 10% вес. $NiAl$, что соответствует величине температурного эффекта реакции 701 кДж/кг;
- 15% вес. $NiAl$, что соответствует величине температурного эффекта реакции 750 кДж/кг;
- 20% вес. $NiAl$, что соответствует величине температурного эффекта реакции 790 кДж/кг.

На рисунках 4.6 — 4.7 приведены распределения температуры синтеза по высоте образца в начальный (рисунок 4.6) и конечный (рисунок 4.7) моменты времени соответственно. Горизонтальной чертой отмечены температура реакции синтеза для системы W-B, нижняя граница температуры образования следующих фазовых составляющих конечного продукта: борид вольфрама, диборид вольфрама и пентаборид дивольфрама.

На представленном распределении видно, что развиваемая температура

горения в процессе синтеза зависит от количества добавленной никель-алюминиевой добавки в исходную шихту реагентов. Также можно предположить, что фазовый состав конечного продукта будет меняться с изменением температуры процесса горения. Так, из распределения видно, что с увеличением добавки выше 10% вес., значения температур лежат или значительно превышают область образования боридов вольфрама (температура образования боридов вольфрама 1600 — 2400 К). При этом образование промежуточных фазовых составляющих конечного продукта синтеза незначительно. Поэтому можно предположить, что в процессе синтеза с использованием реакционно-способной никель-алюминиевой добавки образуется продукт преимущественно с фазовой составляющей боридов вольфрама. Наряду с этим возможно присутствие фазы диборидов вольфрама, поскольку температура на верхнем торце образца не достигает высоких значений и предположительно процесс фазообразования на торце дальше не идет. Из распределения видно, что температура образования фазы пентаборидов вольфрама в процессе синтеза при добавлении выше 10% вес. никель-алюминиевой добавки минует, что позволяет предположить об отсутствии данной фазы в конечном продукте.

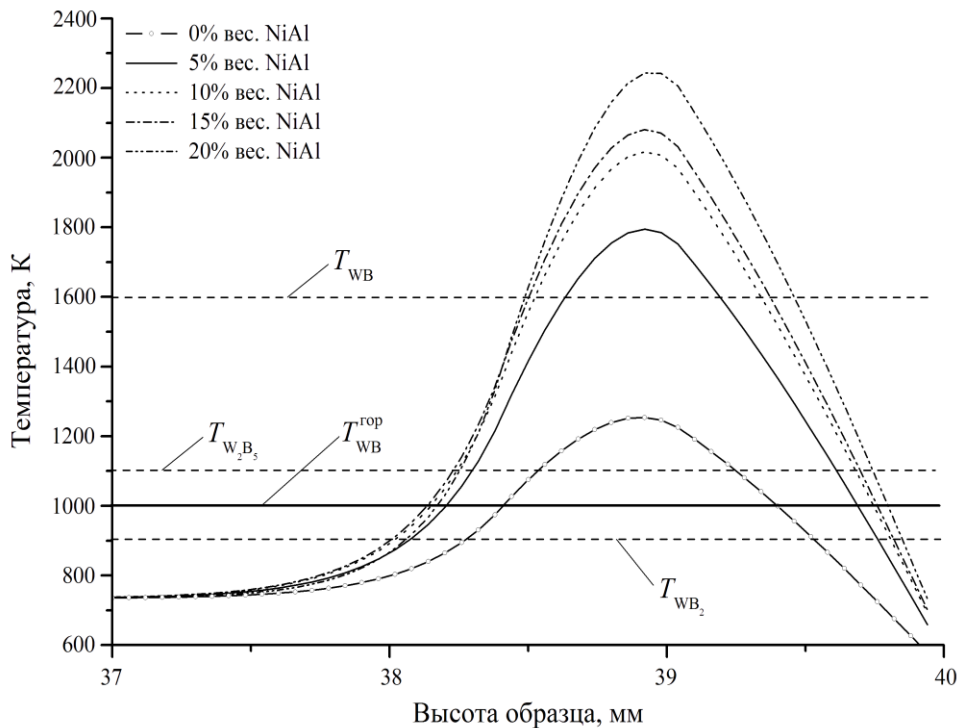


Рисунок 4.6 – Распределение температуры по высоте образца при различных значениях суммарного теплового эффекта в момент времени 0,2 с после инициации синтеза

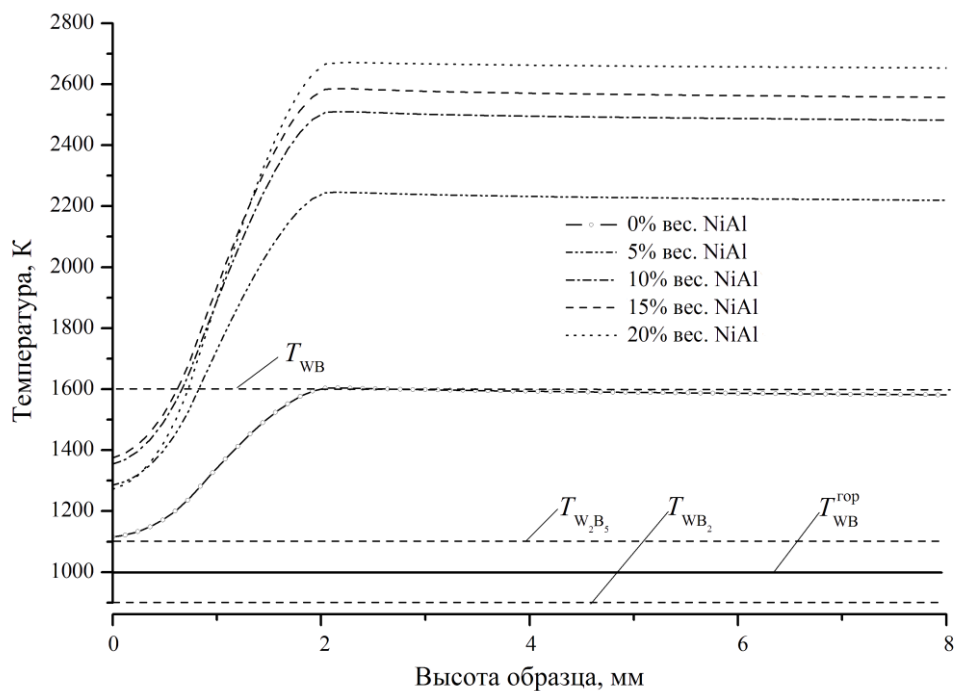


Рисунок 4.7 – Распределение температуры по высоте образца при различных значениях суммарного теплового эффекта в момент времени 3,8 с после инициации синтеза

4.5 Экспериментальное изучение влияния параметров подготовки и проведения СВ-синтеза на формирование температурных полей

В данном разделе рассмотрены результаты экспериментов по получению функциональных материалов для ЯЭУ в режиме СВС. Отработана методика получения и определены соответствующие температурные режимы. Проведены расчетные эксперименты, выявлены основные критерии, оказывающие влияние на проведение синтеза. Выполнен сравнительный анализ результатов численного и приборного экспериментов.

4.5.1 Приборы и техника проведения эксперимента

Синтез материалов методом СВС включает следующие этапы:

- смешивание порошков исходных реагентов согласно стехиометрическому расчету по соответствующим уравнениям реакций;
- сушка исходной шихты реагентов в условиях технического вакуума;
- смешивание в шаровой мельнице;
- прессование исходной шихты реагентов в цилиндрические таблетки различного диаметра и высоты при вариации значений плотностей материала получаемых образцов путем изменения давления прессования;
- осуществление процесса СВС в лабораторной установке и получение образцов функциональных материалов;
- обработка полученных образцов.

Для рассматриваемой системы вольфрам-бор использовались режимы предварительной подготовки и обработки давлением исходной шихты реагентов, а также режим проведения СВС, определенные для численного расчета.

Синтез осуществлялся на экспериментальном стенде пирометрических исследований закономерности процесса СВС, включающем в себя муфельную печь марки СНОЛ 10/11–В; установку вакуумной сушки рисунок 4.8 – сушка

осуществляется в условиях технического вакуума, обеспечиваемых насосом марки 2НВР–5ДМ; трубчатую кварцевую печь для осуществления СВС, снабженную устройством для регулирования температуры печи до 1200К; диагностическое оборудование.

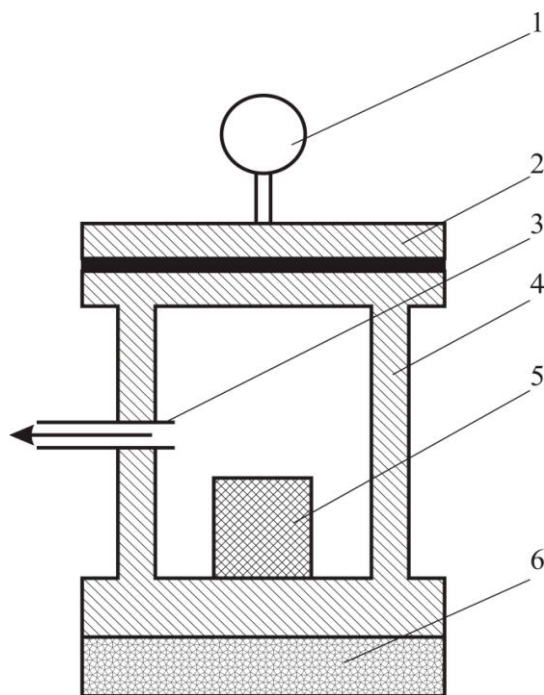


Рисунок 4.8 – Схема процесса вакуумной сушки: 1 – манометр; 2 – крышка; 3 – штуцер; 4 – цилиндрическая камера из нержавеющей стали; 5 – кювета со смесью исходных реагентов; 6 – печь

Смешивание порошков исходных реагентов производится в шаровой мельнице, представляющей собой горизонтально расположенный полый вращающийся цилиндр с набором стальных шариков диаметром 20 мм внутри. Прессование исходной шихты производится с помощью гидравлического пресса модели Р338 (максимальное давление 35 МПа на поверхность площадью 30 см²). Металлические пресс-формы изготовлены из инструментальной стали. Внутренние диаметры матриц 12 мм и 30 мм. Длительность прессования 30 мин.

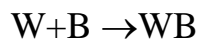
Наиболее сильное влияние на протекание процесса СВС оказывают следующие параметры:

— давление прессования исходной шихты и определяемые им

различные плотности исходных образцов;

— температура начального подогрева исходной шихты.

Исходная шихта готовилась из расчета на прохождение следующей экзотермической реакции (4.25):



После перемешивания в шаровой мельнице и вакуумной сушки исходная шихта прессовалась в цилиндрические образцы диаметром 30 мм и высотой 30–40 мм до значений плотности, лежащих в интервале $3-9 \cdot 10^3$ кг/м³.

Изучение исследуемой системы показало, что устойчивый режим распространения волны горения наблюдается в случаях, когда величина плотности системы составляет около $5 \cdot 10^3$ кг/м³ и выше для любых значений температуры предварительного подогрева. В случае, если плотность системы исходной шихты около $7 \cdot 10^3$ кг/м³ имел место значительный рост удельного энергетического выхода реакций, протекающих в единице объема образца, что приводило к термомеханическому разрушению образцов в процессе синтеза.

Также выяснилось, что оптимальная начальная температура подогрева исходных образцов, при которой наблюдается устойчивое протекание синтеза, составляет 500 К, что было ранее установлено в ходе численных экспериментов по определению адиабатической температуры предварительного подогрева. Установлено, что увеличение температуры предварительного подогрева выше 500 К практически не изменяет температуры во фронте горения при давлениях предварительного прессования, обеспечивающих необходимые условия протекания процесса горения. Однако, при температуре подогрева исходных образцов в диапазоне от комнатной до 450–500 К во многих случаях отмечалось неустойчивость распространения волны горения.

На рисунке 4.9 приведена характерная термограмма СВС-процесса, протекающего в системе W-B при следующих наиболее оптимальных параметрах: плотность исходной системы около 5000 кг/м³, начальная температура 500 К. В начале процесса шло монотонное нагревание исходного

образца до температуры инициации СВС-процесса. При температуре 1000–1150 К на кромках торцов образца инициировалась волна горения, которая распространялась по поверхности образца. При этом температура образца быстро росла, после чего стабилизировалась. На заключительной стадии горение осуществлялось практически в изотермическом режиме при температуре 1600–1750 К. После прохождения волны горения по поверхности образца он остывал до температуры окружающей среды.

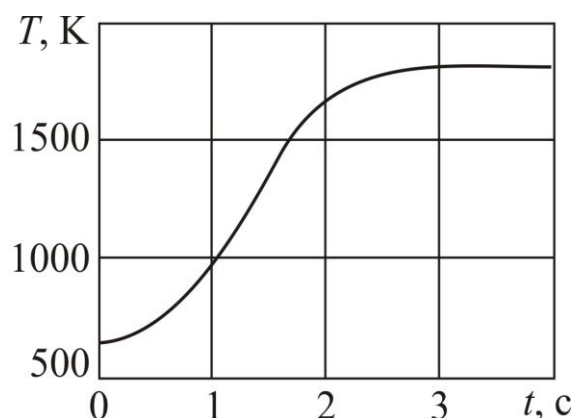


Рисунок 4.9 – Термограмма СВС-процесса, протекающего в системе W-B

4.5.2 Влияние реакционно-способных добавок на тепловые режимы и свойства конечного продукта

Основной причиной недостатков продуктов синтеза является их многофазность, основанная на многостадийности процесса СВС, когда образованию промежуточных продуктов соответствует свой температурный режим. Вследствие быстроты прохождения волны горения, а, следовательно, и неравномерности нагрева образца по объему, в структуре материала образовывались локальные области, где образование конечного продукта оставалось на той или иной стадии образования.

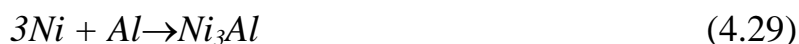
Выходом из создавшейся ситуации могло бы стать увеличение суммарного теплового эффекта протекающих в системе реакций. Это означает, что нужно увеличить температуру процесса настолько, чтобы температурные режимы по всему объему образца позволяли бы полностью завершить СВС.

Одним из решений данной проблемы могло бы стать введение в исходную шихту реагентов стехиометрических реакционно-способных добавок, которые в процессе протекания синтеза вступают между собой в экзотермическую реакцию, тем самым повышая суммарный тепловой эффект протекания СВС.

Анализ предлагаемого подхода показал, что вводимые добавки должны отвечать ряду требований:

1. Вводимые добавки должны вступать между собой в экзотермическую реакцию;
2. Образующиеся продукты не должны иметь большое количество фазовых составляющих;
3. Добавки должны слабо взаимодействовать с основными составляющими реагентами шихты;
4. По возможности, конечными продуктами взаимодействия добавок между собой должны быть соединения, температура плавления которых ниже температур, развивающихся в процессе синтеза;
5. Количество вводимых добавок и их элементарный состав не должны оказать существенное влияние на нейтронно-физические свойства конечного продукта.

Критериями выбора систем, которые можно использовать в качестве добавок, является низкая температура плавления и высокий тепловой эффект реакции. Так, в работе были использованы стехиометрические смеси никеля-алюминия, горение которых приводит к осуществлению следующих реакций:



Данная система характеризуется сравнительно малой температурой плавления основных продуктов при сравнительно большом тепловом эффекте реакции горения.

Для приготовления смеси использовались промышленно изготовленные порошки никеля марки ПНК–ОТ1, алюминия марки ПА–4. В ходе исследований количество добавки варьировалось в пределах от 5% до 25% весовых от массы исходной шихты.

На рисунке 4.10 приведена характерная термограмма процесса горения системы W-B с добавлением 10% масс. Ni-Al в стехиометрии 20% масс. Al- 80% масс. Ni (закономерности горения смесей с добавлением Ni-Al с другой стехиометрией имели аналогичную тенденцию). Подготовленный образец нагревается до температуры около 1000 К, после чего на кромках торцов инициируется волна горения, которая распространяется по поверхности образца. Прохождение данной волны горения создавало условие для протекания вторичной реакции, обусловленной образованием низкотемпературной модификации борида вольфрама и диборида вольфрама во вторичных областях образца.

Проведенные эксперименты показали, что температура горения зависит от количества никель-алюминиевой добавки в исходную шихту реагентов. Так, при содержании в образце дополнительных компонентов в количестве около 15% вес. наблюдается значительный рост температуры процесса (до 2700 К), а около 25 % вес. – термохимическое разрушение образца в процессе синтеза для любой рассматриваемой стехиометрии никель-алюминиевой добавки, вследствие значительного теплового выхода сложных реакций, протекающих в смеси.

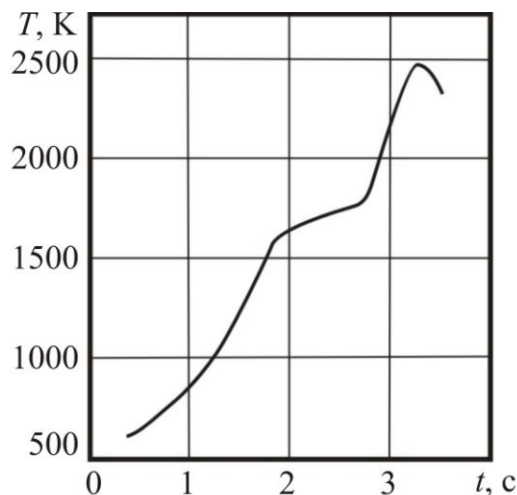


Рисунок 4.10 – Характерная термограмма процесса горения системы W-B с добавлением 10% вес. Ni-Al в стехиометрии 20% масс. Al- 80% масс. Ni

Таким образом, протекание СВС-реакции в значительной мере зависит от ряда условий подготовки и проведения процесса. Картина еще более усложняется при синтезе материалов, в состав которых входят соединения, образующиеся несколькими каналами, которые реализуются в сложной смеси реагентов. В этой ситуации представляет интерес изучение фазового состава, так как эксплуатационные характеристики во многом определяются именно фазовыми составляющими.

С целью определения фазового состава полученных в ходе синтеза материалов был проведен их рентгенофазовый анализ, выполненный на рентгеновском дифрактометре ДРОН-2.0 с излучением меди при использовании селективно поглощающего бета-фильтра. Анализ проведен методом идентификации фаз по межплоскостным расстояниям с применением картотек эталонных веществ и расчетно-аналитическим методом – по диагностическим константам кристаллической решетки.

На рисунке 4.11 приведен фрагмент рентгенограммы, характеризующий фазовые составляющие W-B материала без модификатора. Основной фазой в таком материале являлась низкотемпературная модификация борид вольфрама WB. Менее выражено присутствие в материале фазы диборида вольфрама. В

небольших количествах присутствовали фазы WO_3 и W_2B_5 . Таким образом, и в этом случае был получен многофазовый материал.

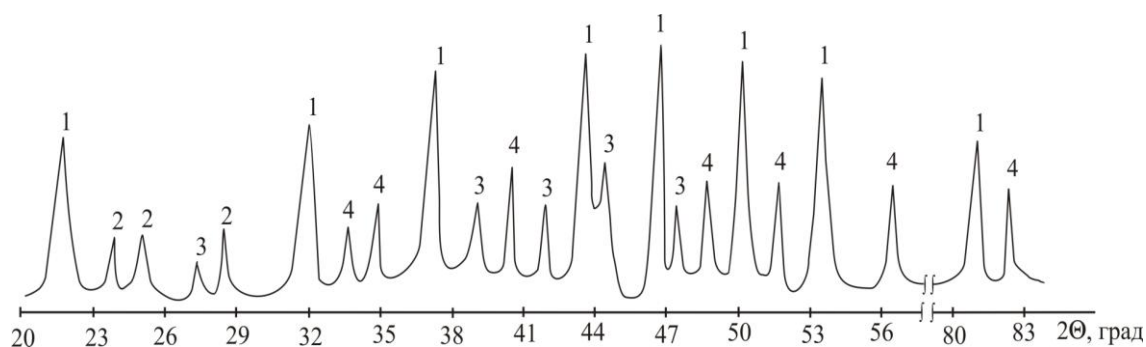


Рисунок 4.11 – Фрагменты рентгенограммы материала на основе борид вольфрама, характеризующие многофазность продукта СВС: 1 — фаза борид вольфрама (WB), 2 — фаза оксида вольфрама WO_3 , 3 — фаза W_2B_4 , 4 — фаза диборида вольфрама

Образование большого количества фазовых составляющих можно объяснить неравномерностью прогрева образца, а, следовательно, и присутствием различных температурных режимов по объему синтезируемого продукта, что в совокупности приводило к протеканию СВС-реакции по различным схемам.

На рисунке 4.12 приведен фрагмент рентгенограммы, характеризующий фазовый состав материалов на основе борид вольфрама с никель-алюминиевой добавкой в количестве 15% вес. от общей массы образца. Наблюдается сдвиг количества фазы WB в сторону уменьшения, фазы диборида вольфрама в сторону увеличения, что делает их конкурирующими по содержанию. На уровне фона присутствует фаза оксида вольфрама WO_3 и интерметаллидов никеля. Таким образом, в результате введения никель-алюминиевой добавки удалось получить практически двухфазный продукт на основе WB- WB_2 .

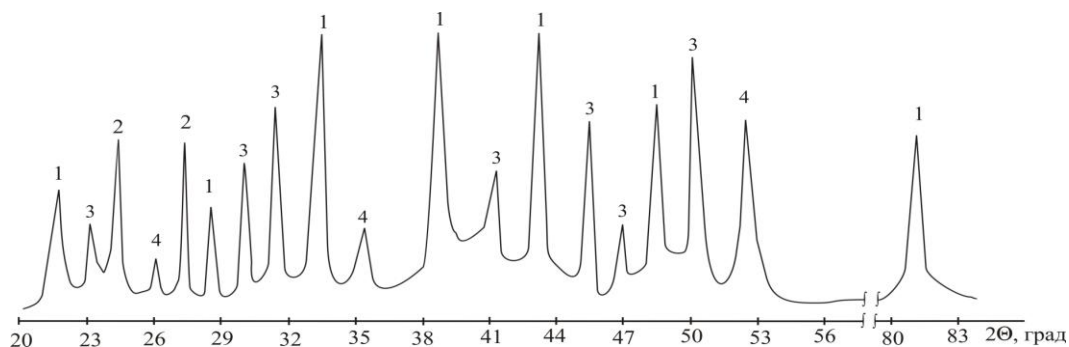


Рисунок 4.12 – Фрагменты рентгенограммы материала на основе борида вольфрама с никель-алюминиевым модификатором: 1 — фаза борида вольфрама WB, 2 — фаза оксида вольфрама WO_3 , 3 — фаза диборида вольфрама, 4 — фаза алюминиды никеля Ni_3Al

По результатам лабораторных экспериментов по получению борсодержащих материалов можно сделать вывод, что для получения целевого продукта с необходимым набором фаз следует подбирать тепловые режимы и параметры подготовки исходной шихты таким образом, чтобы избежать неравномерности распределения температур, значения температурных полей должны перекрывать теоретические значения температур образования фаз, что также способствует полному химическому взаимодействию в шихте.

4.5.3 Сравнительный анализ результатов расчетных и лабораторных экспериментов по синтезу борсодержащих материалов

Для подтверждения корректности разработанной модели теплового состояния необходимо провести сравнительный анализ результатов приборного и численного экспериментов.

Сравнивая результаты численного эксперимента с результатами приборного эксперимента была получена следующая зависимость распределения температуры от плотности исходной системы борсодержащих элементов, представленные на рисунке 4.13.

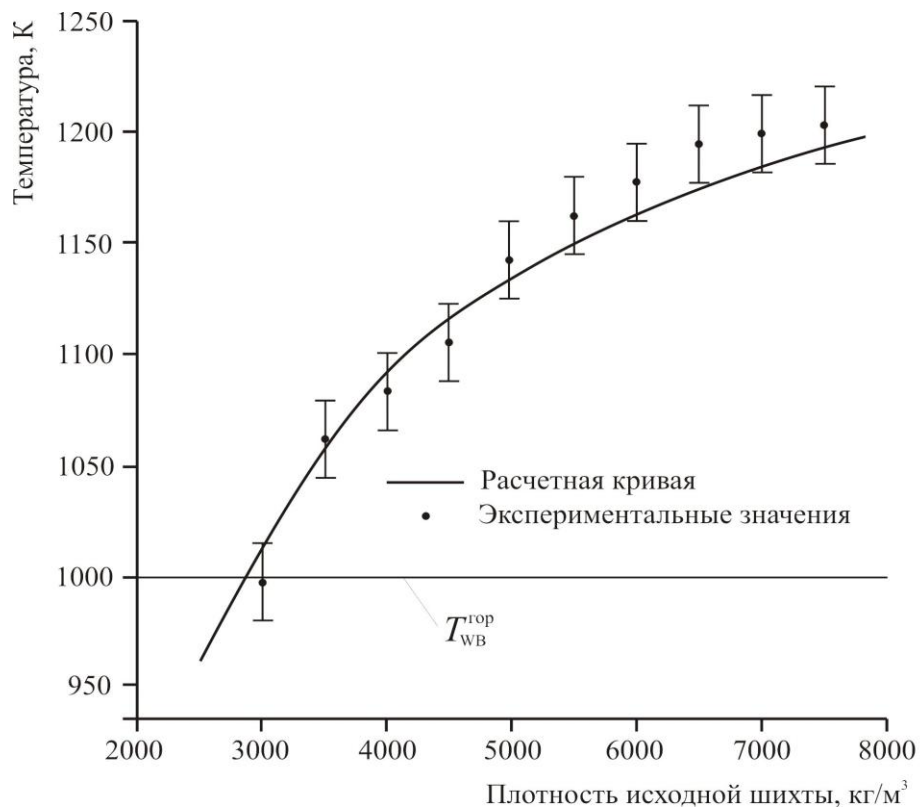


Рисунок 4.13 – Зависимость максимальной температуры процесса синтеза от плотности в начальный момент времени (0,2 с) после инициации реакции для системы W-B

Точками обозначены экспериментальные значения развиваемых температур, полученные по показаниям термопар при различных значениях плотности исходной шихты, связанной с давлением предварительного прессования, а сплошной кривой обозначены расчетные данные. Видно, что значения температур удовлетворительно согласуются между собой.

Полученные в экспериментах предельные значения плотности обусловлены тем фактом, что при плотностях выше 7000 кг/м³ для борид вольфрама, наблюдалось термомеханическое разрушение образцов в процессе синтеза.

Результаты сравнительного анализа для системы вольфрам-бор при изменении плотности исходной системы сведены в таблицу 4.5.

Таблица 4.5 – Сравнение результатов численных и лабораторных экспериментов при изменении плотности исходной системы

Система	Минимальные значения плотности исходной системы, кг/м ³ , установленные при:	
	использовании расчетной модели	проведении лабораторных экспериментов
W-B	2500±250	3000±360

Удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных на данном этапе позволяет говорить о корректности численной методики и возможности расчета других двухкомпонентных СВС-систем.

В численных и лабораторных экспериментах в качестве реакционно-способных добавок использовались смеси никеля и алюминия. Выбор указанных смесей обусловлен тем, что данные элементы вступают между собой в экзотермическую реакцию, тем самым повышая температуру процесса.

В таблице 4.6 представлены результаты, полученные в рамках модели теплового состояния и в приборном эксперименте.

Таблица 4.6 – Фазовый состав материала на основе WB при различных количествах никель-алюминиевой добавки

Количество добавки, % вес.	Фазовые составляющие системы W-B, полученные в ходе:	
	расчетных оценок на основании разработанной модели	лабораторных экспериментов
0	WB; WB ₂ ; W ₂ B ₅	WB; WB ₂ ; W ₂ B ₅ ; WO ₃
15	WB; WB ₂	WB; WB ₂ ; WO ₃ ; Ni ₃ Al

Присутствие фазы оксида вольфрама (WO₃) в обоих объясняется тем, что эксперименты по синтезу бориды вольфрама осуществлялись в атмосфере воздуха. Присутствие фазы Ni₃Al во втором случае обусловлено химическим взаимодействием никеля и алюминия, которые не только увеличивают температуру процесса, но и позволяют получить в структуре материала упрочняющий никель-алюминиевый каркас.

Результаты проведенных расчетно-теоретических и приборных экспериментов показывают удовлетворительное согласие между собой, что позволяет говорить о корректности модели, а также возможности подбора оптимальных начальных значений энергии источника тепловыделения, как фактора, позволяющего управлять реакцией самораспространяющегося высокотемпературного синтеза и, в конечном счете, фазовым составом конечного продукта.

Для системы W-B видно, что минимальная температура предварительного подогрева, обеспечивающая протекание СВС, составляет величину около 600 К. При этом увеличение температуры предварительного подогрева не приводит к значительному росту температуры процесса. Так, увеличение температуры предварительного подогрева для системы W-B с 600 до 800 К в начальный момент времени обеспечивает повышение температуры горения не более чем на 150 К. Такие изменения практически соответствуют погрешности расчетов. При дальнейшем развитии процесса СВС эти изменения становятся еще менее заметными. Вместе с тем, лабораторные эксперименты показали, что влияние начальной температуры на протекание СВС является более существенным. Так, для осуществления процесса СВС в системе W-B становится возможным при температуре предварительного подогрева около 500 К. При этом увеличение начальной температуры приводило в экспериментах к резкому возрастанию температуры процесса и при значениях более 600 К наблюдалось разрушение образца при синтезе.

Сравнивая результаты численного эксперимента с результатами лабораторного эксперимента, была получена следующая зависимость начальной температуры от максимальной температуры процесса. На рисунке 4.14 представлена зависимость в начальный момент времени (0,2 с) после инициации реакции синтеза.

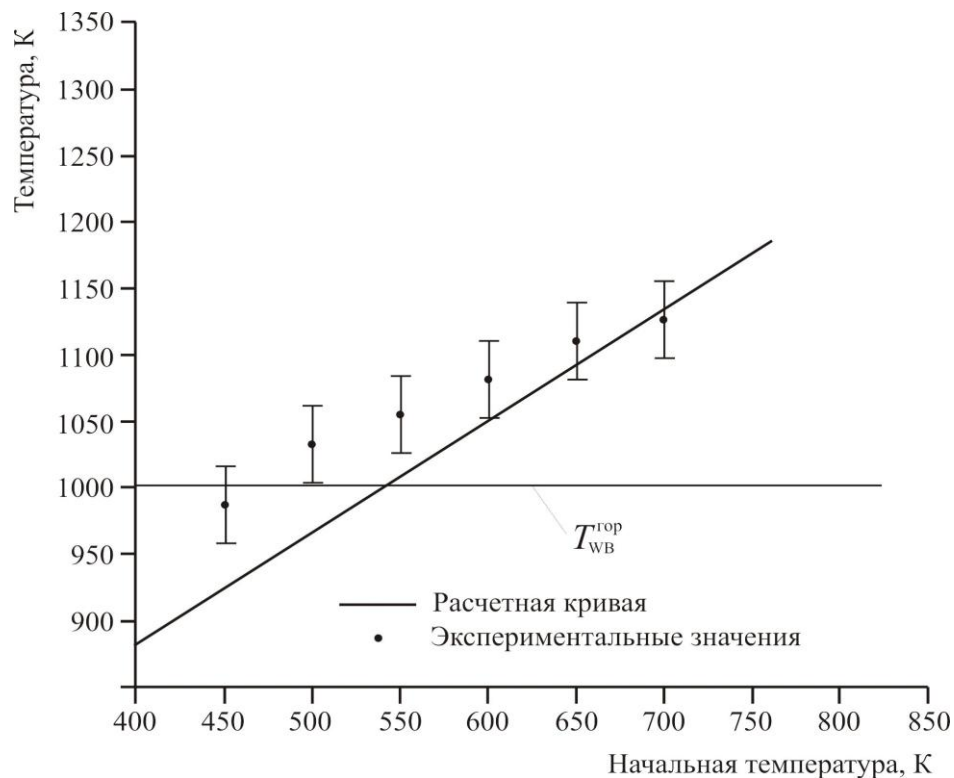


Рисунок 4.14 – Зависимость максимальной температуры процесса синтеза от начальной температуры в начальный момент времени (0,2 с) после инициации реакции для системы W-B

Основные результаты численного и приборного экспериментов сведены в таблицу 4.7.

Таблица 4.7 – Сравнение результатов численных и лабораторных экспериментов при изменении начальной температуры

Система	Значения начальной температуры, К, полученные при:	
	использовании расчетной модели	проведении лабораторных экспериментов
W-B	600 ± 60	500 ± 60

Видно, что расхождение экспериментальных и расчетных результатов составляет 20 — 25%. Установленные расхождения между численным и приборным экспериментами связаны прежде всего с тем, что начальная температура оказывает влияние не только на термодинамические параметры распространения волны горения, прежде всего коэффициенты, входящие в уравнение теплопроводности, но и на кинетику, реализующихся химических реакций, которая в разработанной модели теплового состояния не учитывалась.

Установлено удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных по синтезу борсодержащих материалов, что позволяет применять разработанную модель теплового состояния для направленного синтеза других двухкомпонентных СВС-систем.

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Целью данного раздела является проектирование и создание конкурентоспособных разработок и технологий, отвечающих предъявляемым требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Достижение цели обеспечивается решением задач:

- разработка общей экономической идеи проекта, формирование концепции проекта;
- организация работ по научно-исследовательскому проекту;
- определение возможных альтернатив проведения научных исследований;
- планирование научно-исследовательских работ;
- оценки коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
- определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования [49].

В данной диссертационной работе разработана расчётная модель теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем.

5.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Результатом исследования является получение расчётной модели теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем.

Целевым рынком данного исследования будут являться государственные корпорации по атомной энергетике, атомная и смежные отрасли научной промышленности, области производства, в которых требуются материалы с высокими показателями прочности, например, тяжёлая промышленность.

Сегментировать рынок услуг можно по степени потребности использования данной методики. Результаты сегментирования представлены в рисунке 5.1.

		Модель теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем			
		Атомная промышленность	Научная отрасль	Тяжёлая промышленность	Экспортный контроль
Потребность	Сильная				
	Слабая				

Рисунок 5.1 – Карта сегментирования рынка услуг по использованию оптимальной методики измерения

5.1.1 Анализ конкурентных технических решений

Главное преимущество – это расчёт параметров, при которых будет получен необходимый материал. Расчётная модель позволяет также избежать от многочисленных экспериментов и крупных финансовых затрат на их реализацию. Конкурентами являются:

- Экспериментальное получение материала с нужными параметрами;
- Теоретический расчёт начальных параметров для получения материала.

Оценочная карта анализа представлена в таблице 5.1. Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1. Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i, \quad (1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

V_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Для оценки конкурентных решений были выбраны следующие критерии: повышение производительности труда (насколько данное техническое решение поможет увеличить производительность труда на предприятии); удобство эксплуатации (возможность удобного использования модели для получения необходимых результатов); экономичность (сокращение материальных затрат на получение необходимых данных); надежность (точность и корректность получения данных в любой момент); закрытость получаемых данных (данный пункт важен для того, чтобы доступ к данным расчетной модели имел определенный круг лиц, а также, чтобы модель не оптимизировалась под новые параметры без участия разработчиков); потребность в материальных ресурсах (получение необходимых данных без высокого уровня затрат); стабильность (безотказность расчетной модели при различных устанавливаемых параметрах в любой момент времени); доступность (возможность приобретения предприятиями данной расчетной модели, либо получения результатов расчета заказчиками); конкурентоспособность (преимущества данной расчетной модели над иными способами получения данных); затраты на разработку (сколько потрачено материальных ресурсов на реализацию модели); предполагаемый срок эксплуатации (в течении какого периода возможно получать необходимые данные тем или иным способом); финансирование разработанного метода (начальное и дальнейшее вложение средств для получения данных различными способами).

Таблица 5.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Повышение производительности труда пользователя	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
2. Удобство эксплуатации	0,15	5	4	3	0,75	0,6	0,45
3. Экономичность	0,03	5	2	3	0,15	0,06	0,09
4. Надежность	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
5. Закрытость получаемых данных	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
6. Потребность в материальных ресурсах	0,05	5	1	4	0,25	0,05	0,2
7. Стабильность	0,06	5	3	3	0,3	0,18	0,18
8. Доступность	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность метода	0,04	5	4	3	0,2	0,16	0,12
2. Затраты на разработку	0,12	5	1	3	0,6	0,12	0,36
3. Предполагаемый срок эксплуатации	0,1	5	2	3	0,5	0,2	0,3
4. Финансирование разработанного метода	0,1	5	1	3	0,5	0,1	0,3
Итого	1				5	2,92	3,25

На основании представленного выше анализа можно сделать вывод, что разработанная в данной диссертационной работе модель является наиболее оптимальной для использования в практических целях. Конкурентные методы имеют ряд недостатков, исключаемых разработанной моделью. В свою очередь разработанная модель позволяет существенно снизить финансовые затраты, обеспечивает высокую точность расчётных значений и имеет высокий потенциал развития в дальнейшем.

5.1.2 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта [49].

Сильные стороны – это факторы, характеризующие конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта. Сильные стороны свидетельствуют о том, что у проекта есть отличительное преимущество или особые ресурсы, являющиеся особенными с точки зрения конкуренции. Другими словами, сильные стороны – это ресурсы или возможности, которыми располагает руководство проекта и которые могут быть эффективно использованы для достижения поставленных целей.

Слабые стороны – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей. Это то, что плохо получается в рамках проекта или где он располагает недостаточными возможностями или ресурсами по сравнению с конкурентами.

Возможности включают в себя любую предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта, например, тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза представляет собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта, которые имеют разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем.

В таблице 5.2 представлена интерактивная матрица проекта, в которой показано соотношение сильных сторон с возможностями, что позволяет более подробно рассмотреть перспективы разработки.

Таблица 5.2 – Интерактивная матрица проекта

Возможности проекта	Сильные стороны проекта				
	C1	C2	C3	C4	C5
B1	+	+	+	+	+
B2	+	+	+	+	+
B3	+	+	+	+	+
B4	+	+	+	+	+
B5	+	+	+	+	+

В матрице пересечения сильных сторон и возможностей имеет определенный результат: «плюс» – сильное соответствие сильной стороны и возможности, «минус» – слабое соотношение.

В результате была составлена итоговая матрица SWOT-анализа, представленная в таблице 5.3.

Таблица 5.3 – SWOT-анализ

	<p>Сильные стороны проекта:</p> <p>C1. Актуальность выбранной темы.</p> <p>C2. Применение современного оборудования и программного кода.</p> <p>C3. Бюджетное финансирование.</p> <p>C4. Получение результатов высокой точности.</p> <p>C5. Возможность оптимизации расчётной модели.</p>	<p>Слабые стороны проекта:</p> <p>Сл1. Ограниченное применение конкретной модели.</p> <p>Сл2. Требуется экспериментальное подтверждение результатов.</p> <p>Сл3. Закрытость программного кода.</p> <p>Сл4. Ограниченный круг потребителей.</p> <p>Сл5. Ограниченные возможности расчёта (только для определенных компонентов).</p>
--	---	--

Продолжение таблицы 5.3 – SWOT-анализ

<p>Возможности: В1. Использование модели для исследований. В2. Разработка рекомендаций по применению модели для персонала. В3. Расширение возможностей расчётной модели. В4. Создание материалов требуемых параметров. В5. Дополнительный спрос на результаты исследования.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности»: 1. Полное обеспечение условий для создания и применения модели для расчётов. 2. Появление дополнительного спроса и финансирования, обеспеченных актуальностью тематики и использованием современных расчётных моделей. 3. Высокая точность получаемых результатов позволяет повысить спрос на расчётную модель</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности»: 1. Необходимо экспериментальное подтверждение, что возможно реализовать в условиях вуза. 2. Закрытость расчётной модели не отражается на точности результатов. 3. Круг потребителей можно увеличить с помощью увеличения возможностей расчётной модели.</p>
<p>Угрозы: У1. Низкий спрос со стороны предприятий. У2. Вероятность разработки подобных расчётных моделей другими организациями. У3. Сложность в продвижении модели. У4. Полное отсутствие спроса. У5. Разработка новейших моделей расчёта.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы»: 1. Благодаря возможностям расчётной модели и своевременному финансированию продвижение на рынок может стать успешным. 2. Так как существует возможность оптимизации расчётной модели, то это позволит конкурировать с новейшими разработками. 3. Дополнительное финансирование позволит продвинуть расчётную модель на рынок.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы»: 1. Создание подобных моделей другими организациями можно решить с помощью возможностей расчётной модели, которых нет у конкурентов. 2. Несовершенства разработанной модели можно решить с помощью оптимизации модели под требуемые параметры</p>

Таким образом, выполнив SWOT-анализ можно сделать вывод, что на данный момент преимущества разработанной модели такие как корректность, точность получаемых данных, возможность оптимизации модели, экономичность, стабильность, доступность, удобство эксплуатации, возможность получения данных «здесь и сейчас» значительно преобладают над её недостатками (расчет только для определенного элементного состава, небольшой круг потребителей, закрытость). Все имеющиеся несовершенства

можно легко устранить, воспользовавшись перечисленными выше возможностями.

5.2 Планирование управления научно-техническим проектом

5.2.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта.



Рисунок 5.2 – Иерархическая структура работ

5.2.2 Контрольные события проекта

Ключевые события исследовательского проекта, их даты и результаты приведены в таблице 5.4.

Таблица 5.4– Контрольные события проекта

№	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Разработка технического задания на НИР	1.02.2017	Приказ по ФТИ
2	Составление и утверждение технического задания	3.02.2017	Задание на выполнение исследования
3	Выбор направления исследований	5.02.2017	
4	Подбор и изучение материалов по теме	10.02.2017	Отчёт
5	Календарное планирование работ	12.02.2017	План работ
6	Изучение возможностей расчётной модели	13.02.2017	Отчёт
7	Освоение методики расчёта на практике	14.02.2017	Отчёт
8	Проведение расчётов	15.02.2017- 30.03.2017	Отчёт
9	Анализ полученных данных	28.03.2017	Отчёт
10	Обобщение и оценка результатов	30.03.2017	Отчёт
11	Составление пояснительной записки	14.02.2017- 25.04.2017	Пояснительная записка
12	Проверка правильности выполнения ГОСТа пояснительной записки	26.04.2017	
13	Подготовка к защите	27.04.2017- 25.05.2017	

5.2.3 План проекта

В рамках планирования исследовательского проекта построен календарный план-график с помощью диаграммы Ганта. В данном случае работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения работ [49].

Линейный график представлен в таблице 5.5.

Таблица 5.5– Календарный план проекта

Код работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Разработка технического задания	1	1.02.2017	2.02.2017	Руководитель
2	Составление и утверждение технического задания	1	3.02.2017	4.02.2017	Руководитель
3	Выбор направления исследований	3	5.02.2017	7.02.2017	Руководитель, студент
4	Подбор и изучение материалов по теме	6	7.02.2017	12.02.2017	Студент
5	Календарное планирование работ	1	12.02.2017	13.02.2017	Руководитель, студент
6	Изучение возможностей расчётной модели	1	13.02.2017	14.02.2017	Студент
7	Освоение методики расчёта на практике	1	14.02.2017	14.02.2017	Студент
8	Проведение расчётов	45	15.02.2017	30.03.2017	Студент
9	Анализ полученных данных	2	28.03.2017	30.03.2017	Студент
10	Обобщение и оценка результатов	1	30.03.2017	30.03.2017	Руководитель, студент
11	Составление пояснительной записки	72	14.02.2017	25.04.2017	Студент
12	Проверка правильности выполнения ГОСТа пояснительной записки	1	26.04.2017	27.04.2017	Руководитель, студент
13	Подготовка к защите	29	27.04.2017	25.05.2017	Студент

В таблице 5.6 представлен календарный план-график проведения научного исследования.

Таблица 5.6 – Календарный план-график проведения научного исследования

№ работ	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал.дн.	Продолжительность выполнения работ														
				Февраль			Март			Апрель			Май			Июнь		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	
1	Разработка технического задания	Руководитель	2	■														
2	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	2	■														
3	Выбор направления исследований	Руководитель, студент	5	■	■													
4	Подбор и изучение материалов по теме	Студент	2		■													
5	Календарное планирование работ	Руководитель, студент	1	■	■													
6	Изучение возможностей расчётной модели	Студент	1		■													
7	Освоение методики расчёта на практике	Студент	1		■													
8	Проведение расчётов	Студент	45		■	■	■	■	■									
9	Анализ полученных данных	Студент	2						■	■								
10	Обобщение и оценка результатов	Руководитель, студент	1						■	■								
11	Составление пояснительной записки	Студент	72		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	
12	Проверка правильности выполнения ГОСТа пояснительной записки	Руководитель, студент	1									■	■					
13	Подготовка к защите	Студент	29												■	■	■	

■ – Руководитель ■ – Студент

5.3 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В процессе формирования бюджета используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты;
- затраты на амортизацию отчислений на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

5.3.1 Расчёт материальных затрат

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_M = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{\text{расхи}},$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{\text{расхи}}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы, принимаются в пределах 15 – 25 % от стоимости материалов.

Основными затратами в данной исследовательской работе являются затраты на электроэнергию и приобретение канцелярских товаров. Результаты расчётов по затратам на материалы приведены в таблице 5.7.

Затраты на электроэнергию для работы ПЭВМ рассчитываются по формуле:

$$C = C_{\text{эл}} \cdot P \cdot F_{\text{об}} = 5,8 \cdot 0,5 \cdot 960 = 2784,$$

где $C_{эл}$ – тариф на промышленную электроэнергию (5,8 руб. за 1 кВт·ч);

P – мощность оборудования, кВт;

$F_{об}$ – время использования оборудования, ч.

Затраты на электроэнергию составили 2784 рубля.

Таблица 5.7 – Материальные затраты

Наименование	Марка, размер	Количество	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Электроненергия	–	480 кВт·ч	5,8	2784
Бумага	SvetoCopy	110	0,90	99
Печать на листе А4	–	110	1,5	165
Ручка	Pilot BPS-GP	1	50	50
Доступ в интернет	–	4 месяца	350	1400
Всего за материалы				4498
Транспортно-заготовительные расходы				0
Итого по статье C_m				4498

5.3.2 Расчёт затрат на амортизацию отчислений на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с эксплуатацией специального оборудования, необходимого для проведения работ по конкретной теме.

В данной исследовательской работе к спецоборудованию, необходимому для проведения экспериментальных работ, относится шаровая мельница АГО-2У, стоимость которой составляет 500000 рублей, назначенный срок службы – 5 лет.

Затраты на амортизацию оборудования рассчитываются по формуле:

$$C_{аморт} = C_{об} / T,$$

где $C_{об}$ – стоимость оборудования (руб);

T – срок службы (дней).

$$C_{аморт} = (500000 / 1255) = 398,4 \text{руб/дн.}$$

Оборудование использовалось в течение 30 дней, таким образом, затраты на оборудование:

$$C_{аморт(общ)} = 398,4 \cdot 30 = 11952 \text{руб.}$$

5.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп},$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата;

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) руководителя рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб},$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата одного работника;

$T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.

$Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле

$$Z_{дн} = (Z_{м} \cdot M) / F_{д},$$

где $Z_{м}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

- при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя;
- при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

$F_{д}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 5.8).

Таблица 5.8 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней:	52	52
	14	14
	56	48
Действительный годовой фонд рабочего времени	243	251

Студент во время обучения ежемесячно получает стипендию в размере 1750 руб. (без учета РК).

Основная заработная плата научного руководителя рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда. Отраслевая система оплаты труда в ТПУ предполагает следующий состав заработной платы:

- оклад – определяется предприятием. В ТПУ оклады распределены в соответствии с занимаемыми должностями, например, ассистент, ст. преподаватель, доцент, профессор.

- стимулирующие выплаты – устанавливаются руководителем подразделений за эффективный труд, выполнение дополнительных обязанностей и т.д.

- иные выплаты: районный коэффициент.

Руководителем данной научно-исследовательской работы является сотрудник с должностью доцент. Оклад доцента составляет 26300 руб. (без учета РК).

Для расчета месячного должностного оклада работника применяется формула:

$$Z_m = Z_{ок} \cdot k_p,$$

где $Z_{ок}$ – заработная плата по окладу, руб.;

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Результаты расчёта основной заработной платы исполнителей научного исследования представлен в таблице 5.9.

Таблица 5.9 – Заработная плата исполнителей исследовательской работы

Исполнители	$Z_{ок}$, руб.	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	$Z_{ч}$, руб.	$T_{раб}$	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	26300	1,30	34190	1463	–	8 д.	11704
Студент	1750	1,30	2275	–	–	4 м.	9100
Итого $Z_{осн}$:							19600

5.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды

Размер отчислений во внебюджетные фонды составляет 30 % от суммы затрат на оплату труда работников, непосредственно занятых выполнением исследовательской работы.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot Z_{\text{осн}},$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Величина отчислений во внебюджетные фонды составляет:

$$C_{\text{внеб}} = 0,3 \cdot 11704 = 3511 \text{ руб.}$$

5.3.5 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot Z_{\text{осн}},$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

Накладные расходы в ТПУ составляют 12-16 % от суммы основной и дополнительной зарплаты работников, участвующих в выполнении темы. Примем $k_{\text{накл}} = 15 \%$.

Накладные расходы составляют:

$$C_{\text{накл}} = 0,15 \cdot (11704 + 3511 + 9100) = 3647 \text{ руб.}$$

5.3.6 Формирование бюджета затрат исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таблице 5.10.

Таблица 5.10 – Расчёт бюджета затрат исследовательского проекта

Наименование статьи	Сумма, руб
1. Материальные затраты исследования	4498
2. Затраты на специальное оборудование	11952
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	20804
4. Отчисления во внебюджетные фонды	3511
5. Накладные расходы	3647
Бюджет затрат исследования	44412

5.4 Организационная структура проекта

Организационная структура проекта представляет собой временное структурное образование, создаваемое для достижения поставленных целей и задач проекта и включающее в себя всех участников процесса выполнения работ на каждом этапе.

Данной исследовательской работе соответствует функциональная структура организации. То есть организация рабочего процесса выстроена иерархически: у каждого участника проекта есть непосредственный руководитель, сотрудники разделены по областям специализации, каждой группой руководит компетентный специалист (функциональный руководитель).

Организационная структура научного проекта представлена на рисунке 5.3.

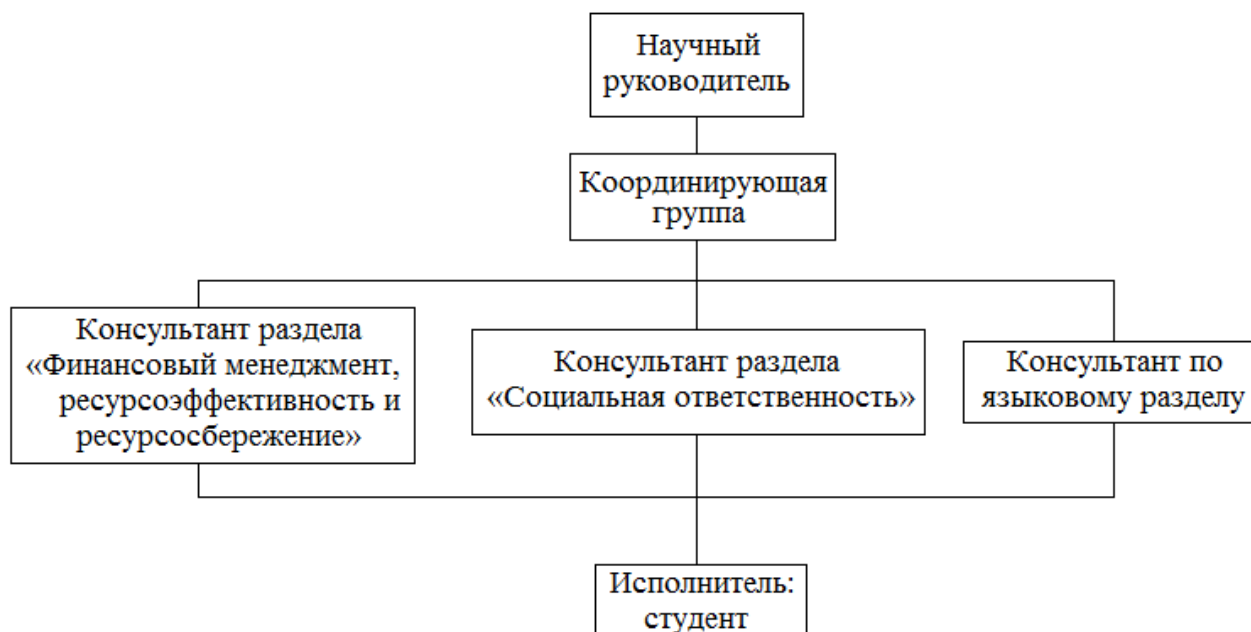


Рисунок 5.3 – Организационная структура научного проекта

5.5 Матрица ответственности

Степень ответственности каждого члена команды за принятые полномочия регламентируется матрицей ответственности. Матрица ответственности данного проекта представлена в таблице 5.11.

Таблица 5.11– Матрица ответственности

Этапы проекта	Научный руководитель	Консультант раздела «Финансовый менеджмент»	Консультант раздела «Соответственность»	Консультант по языковому разделу	Студент
Разработка технического задания	О				
Составление и утверждение технического задания	О				
Выбор направления исследований	О				И
Подбор и изучение материалов по теме	С				И
Календарное планирование работ	О				И

Продолжение таблицы 5.11 – Матрица ответственности

Изучение возможностей расчётной модели					И
Освоение методики расчёта на практике					И
Проведение расчётов	О				И
Анализ полученных данных	О				И
Выполнение оценки ресурсоэффективности и ресурсосбережения		С			И
Выполнение раздела по социальной ответственности			С		И
Выполнение перевода части работы на английский язык				С	И
Обобщение и оценка результатов	С				И
Составление пояснительной записки	С				И
Проверка правильности выполнения ГОСТа пояснительной записки	С				И
Подготовка к защите	О				И

Степень участия в проекте характеризуется следующим образом:

- ответственный (О) – лицо, отвечающее за реализацию этапа проекта и контролирующее его ход;
- исполнитель (И) – лицо (лица), выполняющие работы в рамках этапа проекта.
- утверждающее лицо (У) – лицо, осуществляющее утверждение результатов этапа проекта (если этап предусматривает утверждение);
- согласующее лицо (С) – лицо, осуществляющее анализ результатов проекта и участвующее в принятии решения о соответствии результатов этапа требованиям.

5.6 Оценка научно-технического эффекта

Социально-научный эффект проявляется в росте числа открытий, изобретений, увеличении суммарного объёма научно-технической информации,

полученной в результате выполнения НИОКР, создании научного «задела», являющегося необходимой предпосылкой для проведения в будущем прикладных НИОКР и выполнения работ по модернизации конструкции выпускаемых изделий.

За последние годы появились предложения не только по качественной характеристике социального эффекта, но и по системе количественных показателей его оценки.

Элементом количественной оценки социально-научного эффекта следует считать определение научно-технического эффекта НИОКР. Методика состоит в том, что на основе оценок признаков работы определяется коэффициент научно-технического эффекта НИОКР:

$$H_T = \sum_{i=1}^3 r_i \cdot k_i,$$

где r_i — весовой коэффициент i -того признака (определяется по таблице 3.6.1);

k_i — количественная оценка i -того признака.

Таблица 5.12

Признак научно-технического эффекта НИОКР (i)	Примерные значения весового коэффициента (r)
Уровень новизны	0,6
Теоретический уровень	0,4
Возможности реализации	0,2

Количественная оценка уровня новизны НИОКР определяется на основе значения баллов по таблице 5.13.

Таблица 5.13

Уровень новизны разработки	Характеристика уровня новизны	Баллы
Принципиально новая	Результаты исследований открывают новое направление в данной области науки и техники	8-10
Новая	По-новому или впервые объяснены известные факты, закономерности	5-7
Относительно новая	Результаты исследований систематизируют и обобщают имеющиеся сведения, определяют пути дальнейших исследований	2-4
Традиционный характер	Работа, выполненная по традиционной методике, результаты исследований носят информационный характер	1
Не обладающая новизной	Получен результат, который был ранее известен	0
Относительно новая	Результаты исследований систематизируют и обобщают имеющиеся сведения, определяют пути дальнейших исследований	2-4

Теоретический уровень полученных результатов НИОКР определяется на основе значения баллов, приведённых в таблице 5.14.

Таблица 5.14

Теоретический уровень полученных результатов	Баллы
Установление закона; разработка новой теории	10
Глубокая разработка проблемы: многоаспектный анализ связей, взаимозависимости между фактами с наличием объяснения	8
Разработка способа (алгоритм, программа мероприятий, устройство, новшество и т.п.)	6
Элементарный анализ связей между фактами с наличием гипотезы, симплексного прогноза, классификации, объясняющей версии или практические рекомендации частного характера	2
Описание отдельных элементарных фактов (вещей, свойств и отношений); изложение опыта, наблюдений, результатов измерений	0,5

Возможность реализации научных результатов определяется на основе значения баллов (таблица 5.15).

Таблица 5.15

Время реализации	Баллы
В течение первых лет	10
От 5 до 10 лет	4
Более 10 лет	2
Масштабы реализации	Баллы
Одно или несколько предприятий	2
Отрасль (министерство)	4
Народное хозяйство	10
Примечание: Баллы по времени и масштабам реализации складываются	

Результаты исследований систематизируют и обобщают имеющиеся сведения, вследствие чего определим уровень новизны разработки как новый, т.е. $k_1 = 7$.

В результате исследования была разработана расчётная модель теплового состояния образцов при горении двухкомпонентных борсодержащих СВС-систем. В соответствии с таблицей 5.14 $k_2 = 6$.

Возможность реализации результатов разработки: по времени - в течение первых лет, по масштабам реализации - на одном или нескольких предприятиях. В соответствии с таблицей 5.15 $k_3 = 10+2 = 12$.

$$H_T = 0,6 \cdot 7 + 0,4 \cdot 6 + 0,2 \cdot 12 = 9$$

Таблица 5.16 — Оценка уровня научно-технического эффекта

Уровень научно-технического эффекта	Коэффициент научно-технического эффекта
Низкий	1-4
Средний	5-7
Сравнительно высокий	8-10
Высокий	11-14

В соответствии с таблицей 5.16, уровень научно-технического эффекта – сравнительно высокий.

Заключение

1. Реализована модель теплового состояния, основанная на решении нестационарного уравнения теплопроводности с подвижным источником тепловыделения.

2. Основной отличительной особенностью при решении уравнения теплопроводности является использование подвижного пространственно-распределенного источника объемного тепловыделения, а также температурной зависимости теплоемкости, определяемой с использованием квантовой модели Дебая, позволяющей связать температуру с параметрами подготовки исходной шихты компонентов.

3. В ходе расчетно-теоретического анализа определены температурные режимы протекания СВС-реакций в борсодержащих системах. А также получены термограммы горения для рассматриваемой борсодержащей системы.

4. В сочетании с лабораторными экспериментами определено, что при рассмотрении влияния начальной температуры процесса необходим учет кинетики химических реакций, которые реализуются в исследуемой системе.

5. Удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных по синтезу борсодержащих материалов позволяет применять разработанную модель теплового состояния для направленного синтеза других двухкомпонентных СВС-систем.

Список публикаций

1. Исследование влияния частоты механоактивации компонентов шихты на процесс получения пористых материалов самораспространяющимся высокотемпературным синтезом // Энергетика: Эффективность, надежность, безопасность: материалы XX Всероссийской научно-технической конференции / Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. Т. II. – 176 с.

2. Исследование влияния частоты механоактивации компонентов шихты на процесс получения пористых материалов самораспространяющимся высокотемпературным синтезом // Сборник трудов IV Международной молодежной научной школы-конференции «Современные проблемы физики и технологий»/ НИЯУ МИФИ. – Москва: Изд-во НИЯУ МИФИ, 2015. – 267 с.

3. Использование технологии СВС для создания функциональных борсодержащих материалов // VII Школа-конференция молодых атомщиков Сибири: сборник тезисов докладов / СТИ НИЯУ МИФИ. – Северск: Изд-во СТИ НИЯУ МИФИ, 2016. – 126 с.