

УДК 536.46

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТВЕРДОФАЗНОЙ РЕАКЦИИ В УСЛОВИЯХ СОПРЯЖЕННОГО ТЕПЛООБМЕНА

К. А. Алигожина^{1,2}, А. Г. Князева^{1,2,3}¹Томский политехнический университет, 634050 Томск, kam.777@mail.ru²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск³Томский государственный университет, 634050 Томск

Предложена модель процесса распространения твердофазной экзотермической реакции в слое между инертными материалами с различными теплофизическими свойствами. Модель реализована численно. Исследованы зависимости времени зажигания от параметров модели, а также поведение во времени некоторых энергетических характеристик в разных условиях (запаса тепла в прогретом слое, избытка энтальпии). Продемонстрировано влияние теплофизических свойств инертных материалов на распределение температуры в образце в стационарных и нестационарных режимах.

Ключевые слова: твердофазная реакция, сопряженный теплообмен, режимы превращения, распределение температуры.

DOI 10.15372/FGV20170405

ВВЕДЕНИЕ

Технологии получения и обработки материалов, основанные на синтезе горением, весьма разнообразны [1–4]. Среди них особое место занимают технологии соединения материалов с разными свойствами, которые сопровождаются образованием различных интерметаллидных, карбидных, нитридных фаз. Например, в [5] исследовано влияние начального подогрева на соединение оксидных керамик с использованием объемного горения в шве. Авторы [6] применили синтез горением для соединения чугуна и медного сплава. Соединение Cu/Cu было получено в работе [7] при использовании реакции в многослойной пленке Ni–Al в качестве источника тепла. Возможность соединения компакта, изготовленного из порошков Ni и Al (Ni, Al и NiO), с молибденовой фольгой одновременно с синтезом интерметаллидов была изучена в [8]. Соединение титановой пластины с аустенитным никель-хромовым сплавом в [9] также было осуществлено с помощью реакции в порошковой прессовке Ni–Al. Авторы [10] изучали формирование переходных слоев при соединении керамики и никелевого сплава при протекании объемных реакций в уплотняющем составе (в шве).

Соединение разнородных материалов, основанное на использовании экзотермических

реакций в шве, было описано в работах [11–13]. В обзоре [11] авторы дали классификацию технологических процессов сварки посредством горения, типичную для классификации процессов синтеза горением: синтез горением в объеме и самораспространяющийся высокотемпературный (послойный) синтез (СВС). Как правило, для обеспечения хорошего контакта и получения плотной структуры шва прикладывается внешнее давление [9–13]. Инициирование реакций осуществляется различными способами: искрой, джоулевым нагревом, лазером, микроволновым излучением и др.

Для управления формированием соединения с нужными свойствами важно знать условия, при которых реализуется тот или иной режим. Результат зависит как от условий иницирования реакций, так и от сочетания свойств соединяемых материалов и соединительного состава. Детальное экспериментальное исследование в этой области сталкивается с большими затратами и невозможностью варьировать условия и параметры в широких диапазонах их изменения. Поэтому для изучения физических явлений применяется математическое моделирование. Так, в [14, 15] теоретически изучалась возможность снижения температуры теплового взрыва при соединении материалов в режиме объемного синтеза. Режимы послойного распространения экзотермической реакции в веществе, расположенном меж-

ду инертными материалами, свойства которых варьировались, описаны в [16, 17]. Отдельные расчеты процесса сварки титановых и алюминиевых пластин в рамках трехмерной модели представлены в [18]. Авторы [9] использовали коммерческий код Comsol-Multiphysics для моделирования реакции в смеси Ni—Al в условиях СВС-сварки.

В ряде работ [2, 11–13] отмечается, что при соединении разнородных материалов с помощью экзотермических составов иногда наблюдается растрескивание, что может быть связано с высокими градиентами температуры в зоне реакции и с различием свойств веществ [19]. Изучение подобных проблем приводит к задачам о термомеханической устойчивости твердофазного горения [20–24].

К моделированию процесса формирования шва при сварке имеет отношение и работа [25].

В настоящей работе численно исследуется влияние теплофизических свойств соединяемых разнородных материалов на характеристики зажигания и горения между ними экзотермического состава.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Задача о распространении реакции в твердой фазе в условиях сопряженного теплообмена (в пространстве между двумя инертными материалами с разными свойствами) рассматривается в следующей постановке.

1. Инертные материалы и реагент расположены параллельно друг другу. Образец нагревается в плоскости $x = 0$ (рис. 1, а), на которую падает равномерно распределенный тепловой поток. Верхняя и нижняя поверхности составного образца теплоизолированы. На боковых гранях $x = 0$ и $x = l$ также считаем справедливыми условия адиабатичности. Следовательно, процессы в каждом сечении, перпендикулярном оси z , идентичны, поэтому задача будет двумерной в плоскости xOy (рис. 1, б). Вследствие различия свойств материалов в системе возможны значительные градиенты температуры в направлении, перпендикулярном направлению протекания реакции, что не позволяет ограничиться простейшей постановкой задачи и формальным учетом потерь тепла в инертные материалы по закону Ньютона.

2. Физические свойства соединяемых материалов и реагента, а также продуктов реакции предполагаются не зависящими от температу-

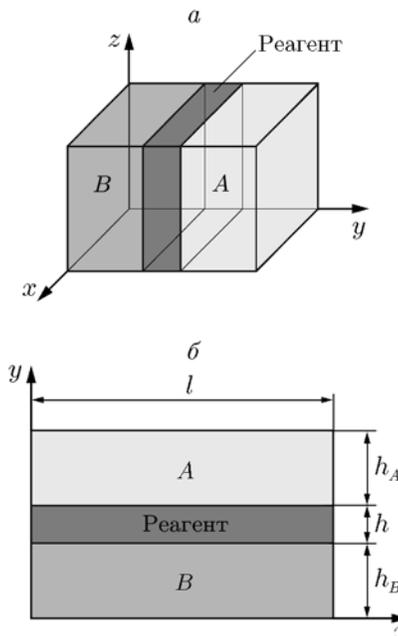


Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи

ры и степени превращения. Тепловой контакт между слоями — идеальный.

3. Химические превращения в реагенте опишем суммарной химической реакцией первого порядка: скорость реакции пропорциональна доле неизрасходованного реагента. Как показали результаты предыдущих исследований [15], плавление оказывает влияние на количественные характеристики процесса вследствие дополнительных затрат тепла. Однако плавление в зоне реакции не приводит к качественно новым явлениям, поэтому в настоящей работе роль плавления не анализируется.

Математическая постановка задачи об иницировании реакции между разнородными материалами включает в себя уравнение теплопроводности в реагенте:

$$h_B \leq y \leq h_B + h:$$

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + QW(a, T)$$

и уравнения теплопроводности в соединяемых материалах:

$$0 \leq y \leq h_B:$$

$$c_{B\rho_B} \frac{\partial T_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_B \frac{\partial T_B}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_B \frac{\partial T_B}{\partial y} \right),$$

$$h_B + h \leq y \leq h_B + h + h_A:$$

$$c_A \rho_A \frac{\partial T_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_A \frac{\partial T_A}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_A \frac{\partial T_A}{\partial y} \right).$$

Полагаем, что скорость реакции зависит от температуры по закону Аррениуса. Кинетическое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} = W &= k_0 \varphi_1(a) \varphi_2(T) = \\ &= k_0 (1-a) \exp \left(-\frac{E_a}{RT} \right). \end{aligned}$$

На внешних границах заданы следующие условия:

$$x = 0: -\lambda_k \frac{\partial T_k}{\partial x} = \begin{cases} q_0, & t < t_1, \\ 0, & t \geq t_1, \end{cases}$$

$$x \rightarrow l: \frac{\partial T_k}{\partial x} = 0,$$

$$y = 0: \frac{\partial T_B}{\partial y} = 0,$$

$$y = h_B + h + h_A: \frac{\partial T_A}{\partial y} = 0,$$

на границах между материалами —

$$y = h_B + h: \lambda \frac{\partial T}{\partial y} = \lambda_A \frac{\partial T_A}{\partial y}, \quad T = T_A,$$

$$y = h_B: \lambda \frac{\partial T}{\partial y} = \lambda_B \frac{\partial T_B}{\partial y}, \quad T = T_B.$$

В начальный момент времени температуры веществ одинаковы и равны начальной температуре, продукт отсутствует:

$$t = 0: T = T_A = T_B = T_0, \quad a = 0.$$

В задаче приняты следующие обозначения: h — толщина слоя реагента; h_A, h_B — толщина слоя инертного материала A, B ; T_k — температура; a — степень превращения; λ_k, c_k, ρ_k — теплопроводность, теплоемкость и плотность материалов; t_1 — время действия импульсного источника; Q — тепловыделение в химической реакции; k_0 — предэкспоненциальный множитель; E_a — энергия активации; R — универсальная газовая постоянная; индексами A и B обозначены характеристики инертных материалов, величины без индекса относятся к реагенту.

Для уменьшения числа переменных и количества необходимых численных расчетов перейдем к безразмерным переменным:

$$\theta = \frac{T - T_*}{RT_*^2} E, \quad \xi = \frac{x}{x_*}, \quad \eta = \frac{y}{x_*}, \quad \tau = \frac{t}{t_*},$$

где

$$x_* = h, \quad t_* = \frac{\gamma}{k_0} \exp \frac{E}{RT_*}, \quad T_* = \sqrt{\frac{q_0 E h}{R \lambda}}.$$

В результате задача принимает вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\text{Fr}} \Delta \theta + (1-a) \exp \frac{\theta}{1 + \beta \theta},$$

$$\frac{\partial a}{\partial \tau} = \gamma (1-a) \exp \frac{\theta}{1 + \beta \theta}, \quad \delta_B < \eta < \delta_B + 1,$$

$$K_{cA} \frac{\partial \theta_A}{\partial \tau} = K_{\lambda A} \frac{1}{\text{Fr}} \Delta \theta_A,$$

$$\delta_B + 1 < \eta < \delta_B + 1 + \delta_A,$$

$$K_{cB} \frac{\partial \theta_B}{\partial \tau} = K_{\lambda B} \frac{1}{\text{Fr}} \Delta \theta_B,$$

$$0 < \eta < \delta_B,$$

$$\xi = 0: K_{\lambda A} \frac{\partial \theta_A}{\partial \xi} = \begin{cases} 1, & \tau < \tau_0, \\ 0, & \tau \geq \tau_0, \end{cases}$$

$$-\frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \begin{cases} 1, & \tau < \tau_0, \\ 0, & \tau \geq \tau_0, \end{cases}$$

$$-K_{\lambda B} \frac{\partial \theta_B}{\partial \xi} = \begin{cases} 1, & \tau < \tau_0, \\ 0, & \tau \geq \tau_0, \end{cases}$$

$$\eta = 0: \frac{\partial \theta_B}{\partial \eta} = 0,$$

$$\eta = \delta_B: K_{\lambda B} \frac{\partial \theta_B}{\partial \eta} = \frac{\partial \theta}{\partial \eta}; \quad \theta_B = \theta,$$

$$\eta = \delta_B + 1: K_{\lambda A} \frac{\partial \theta_A}{\partial \eta} = \frac{\partial \theta}{\partial \eta}, \quad \theta_A = \theta,$$

$$\eta = \delta_B + 1 + \delta_A: \frac{\partial \theta_A}{\partial \eta} = 0,$$

$$\xi \rightarrow l: \frac{\partial \theta_k}{\partial \xi} = 0,$$

$$\tau = 0: \theta_A = -\theta_0; \quad \theta = -\theta_0; \quad \theta_B = -\theta_0,$$

где

$$\delta_A = \frac{h_A}{x_*}, \quad \delta_B = \frac{h_B}{x_*}, \quad \beta = \frac{RT}{E},$$

$$\gamma = \frac{c\rho RT_*^2}{EQ}, \quad \theta_0 = \frac{T_0 - T_*}{RT_*^2} E,$$

$$K_{\lambda A} = \frac{\lambda_A}{\lambda}, \quad K_{\lambda B} = \frac{\lambda_B}{\lambda}, \quad K_{cA} = \frac{c_A \rho_A}{c\rho},$$

$$K_{cB} = \frac{c_B \rho_B}{c\rho}, \quad Fr = \frac{h^2}{x_T^2}$$

— параметры задачи, $x_T = \sqrt{\alpha_T t_*}$ — характерный тепловой масштаб, $\alpha_T = \lambda/c\rho$ — коэффициент температуропроводности, θ_0 — число Зельдовича.

Задача решена численно по неявной разностной схеме второго порядка аппроксимации по пространственным координатам и первого порядка по времени с использованием расщепления по координатам и линейной прогонки. Граничные условия аппроксимированы со вторым порядком. Источник тепла в уравнении теплопроводности для реагента, связанный с химическим тепловыделением, взят с нижнего слоя по времени. Для тестирования программы задачи использовано сравнение с простейшими одномерными задачами теплопроводности, а также с результатами численного исследования задачи о соединении материалов в симметричной постановке [16].

Выбор области варьирования параметров определяется типичными материалами, подходящими для соединения рассматриваемым способом. Как известно, особое применение твердофазный синтез находит для соединения керамики между собой, а также с металлами. Удобнее сваривать с керамикой металлы, имеющие низкий коэффициент теплового расширения и высокую температуру плавления, поэтому в первых экспериментах это был молибден. Для обеспечения требуемого контакта с СВС-продуктами пространство между соединяемыми деталями из молибдена и керамики обычно заполняется гранулами состава Ti + 2В или Ti + С, которые поджигаются внешним источником. При сварке керамики с керамикой (SiC и SiC) используется та же схема с порошковой смесью Ti + С + Ni. Учитывая это, приходим к достаточно широкой области изменения параметров: $0.1 \leq K_c \leq 10$, $0.1 \leq K_\lambda \leq 50$.

На основе модели в работе определялись характеристики зажигания, поведение некоторых энергетических характеристик, а также изучались различные режимы горения.

2. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

2.1. Время зажигания

Предварительные исследования [26] показали, что критерий зажигания можно выбрать различными способами: по перегибу на кривой «максимальная температура в реагенте — время», по скорости роста максимальной температуры, по заданному значению степени превра-

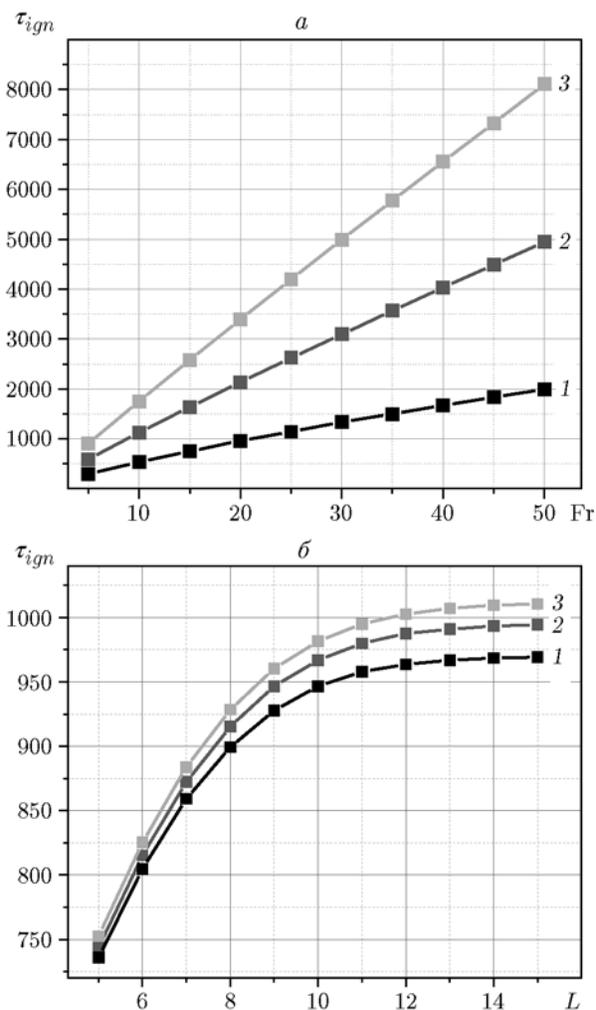


Рис. 2. Зависимость времени зажигания от соотношения характерных длин:

$\beta = 0.03$, $\gamma = 0.03$, $K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 1$; а — $K_{cA} = K_{cB} = 1$, $\theta_0 = 10$ (1), 15 (2), 20 (3); б — $K_{cB} = 1$, $\theta_0 = 10$, $Fr = 20$, $K_{cA} = 1$ (1), 2 (2), 3 (3)

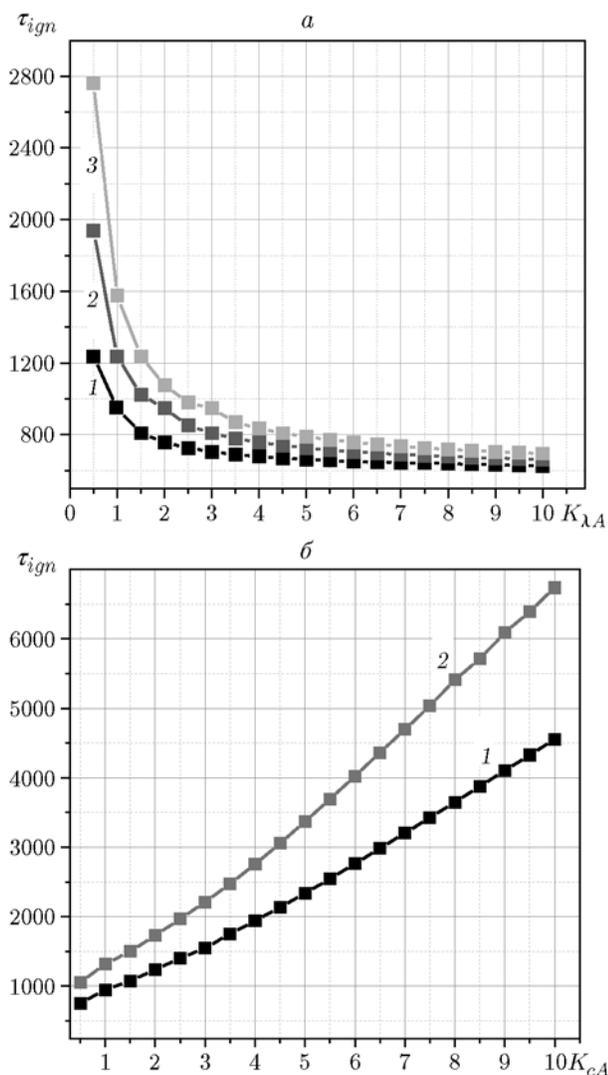


Рис. 3. Зависимость времени зажигания от соотношения теплофизических свойств материалов:

$\beta = 0.03$, $\gamma = 0.03$, $\theta_0 = 10$, $Fr = 20$; *a* — $K_{\lambda B} = 1$, $K_{cB} = 1$, $K_{cA} = 1$ (1), 2 (2), 3 (3); *б* — $K_{\lambda B} = 1$, $K_{cB} = 1$, $Fr = 20$ (1), 30 (2)

щения и др. В данной работе выбран первый из перечисленных критериев. Определенное таким образом время зажигания приведено в зависимости от параметров модели на рис. 2 и 3.

Параметр Франк-Каменецкого Fr в данной модели представляет собой квадрат отношения ширины области, занятой реагентом, к характерному тепловому масштабу, который в нем формируется за время t_* . Время зажигания зависит от параметра Fr линейно (рис. 2, *a*). При увеличении числа Зельдовича тангенс угла наклона функции $\tau_{ign}(Fr)$ растет. Первое связано

с увеличением области, которую нужно прогреть перед зажиганием. Второе можно связать с уменьшением начальной температуры. Это типично для задач теории зажигания [27].

Параметр L есть соотношение двух характерных пространственных масштабов — длины образца и ширины области, занятой реагентом. С увеличением L растет, разумеется, размер области, в которой протекают реакции, а также линейные размеры соединяемых материалов, между которыми идет реакция, что ведет к увеличению необходимого запаса тепла, и время зажигания возрастает (рис. 2, *б*). Начиная с некоторого значения, зависящего от соотношения теплофизических свойств материалов, увеличение длины образца практически не изменяет время зажигания, что связано с конечной шириной зоны прогрева, необходимой для начала химической реакции. Слои материалов, расположенные далеко за пределами зоны прогрева, не оказывают влияния на инициирование реакции.

От параметра $K_{\lambda A}$ время зажигания зависит экспоненциально (рис. 3, *a*), причем на участке, соответствующем большим значениям $K_{\lambda A}$, влияние соотношения теплоемкостей материала A и реагента незначительно. Чем выше теплопроводность соединяемых материалов (или одного из них), тем быстрее прогревается реагент в зоне контакта с ним, тем меньше время зажигания. При $K_{\lambda A} > 5$ (для данного набора параметров) влиянием соотношения теплопроводностей можно пренебречь. Чем больше различаются теплопроводности материалов A и B , тем более несимметричным будет развитие реакции в зоне прогрева. Рост теплопроводности одного из материалов приводит к увеличению зоны прогрева у его границы и, следовательно, к несимметричности процесса. Подробно это показано в [28].

Зависимость времени зажигания от параметра K_{cA} (рис. 3, *б*) можно назвать практически линейной: чем выше теплоемкость, тем больше потери тепла в окружающие материалы в процессе нагрева, зажигания и горения. Область, где инициируется реакция, смещается к материалу, для нагрева которого требуется меньше тепла (т. е. он обладает меньшей теплоемкостью).

2.2. Устойчивость зажигания

При инициировании реакции наиболее важно знать, при каких условиях реализуется

устойчивый режим распространения реакции по соединительному составу, который должен обеспечить формирование шва.

Авторами [29] для нахождения критерия устойчивости зажигания предложено использовать следующие характеристики, рассчитываемые по данным для области, занятой реагентами: полное химическое тепловыделение Q_{ch} , тепловой поток из приповерхностной зоны химической реакции ψ , запас тепла в прогревом слое W и избыток энтальпии ΔH :

$$Q_{ch} = \rho Q k_0 \int_0^{\infty} (1 - \eta) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) dx,$$

$$\psi = \lambda \max \left| \frac{\partial T}{\partial x} \right|, \quad W = c\rho \int_0^{\infty} (T - T_0) dx,$$

$$\Delta H = c\rho \int_0^{\infty} \left(T - T_0 - \frac{Q}{c} a \right) dx.$$

Подобные характеристики использованы и в [30]. Анализируя их поведение во времени, можно выяснить, действительно ли установился требуемый процесс. Только резкого роста температуры у поверхности, где действует внешний источник тепла, недостаточно, чтобы говорить о зажигании.

Эти характеристики были приведены к безразмерному виду с помощью следующих масштабов:

$$Q_{ch*} = q_0 = \frac{RT_*^2 \lambda}{Eh}, \quad \psi_* = q_0 = \frac{RT_*^2 \lambda}{Eh},$$

$$W_* = c\rho(T_* - T_0)h, \quad \Delta H_* = c\rho(T_* - T_0)h.$$

В безразмерной форме имеем:

$$Q_{ch} = Fr \int_0^{\infty} \int_{\delta_B}^{\delta_B+1} (1 - a) \exp \frac{\theta}{1 + \beta\theta} d\eta d\xi,$$

$$\psi = \max \left| \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \right|,$$

$$W = \frac{1}{\theta_0} \int_0^{\infty} \int_{\delta_B}^{\delta_B+1} (\theta + \theta_0) d\eta d\xi,$$

$$\Delta H = \frac{1}{\theta_0} \int_0^{\infty} \int_{\delta_B}^{\delta_B+1} \left(\theta + \theta_0 + \frac{a}{\gamma} \right) d\eta d\xi.$$

Качественно различное поведение некоторых из этих величин при разных длительностях импульса τ_0 иллюстрируют рис. 4 и 5. Для расчетов взяты следующие значения параметров: $\theta_0 = 10$, $\beta = 0.03$, $\gamma = 0.03$, $Fr = 20$, $K_{cA} = K_{cB} = 1$.

Если тепла недостаточно для устойчивого развития зажигания, то полное химическое тепловыделение быстро убывает после отключения внешнего источника (рис. 4,а). Вместе с тем увеличение запаса тепла замедляется с некоторого момента времени, соответствующего замедлению реакции (рис. 4,б). Запас тепла

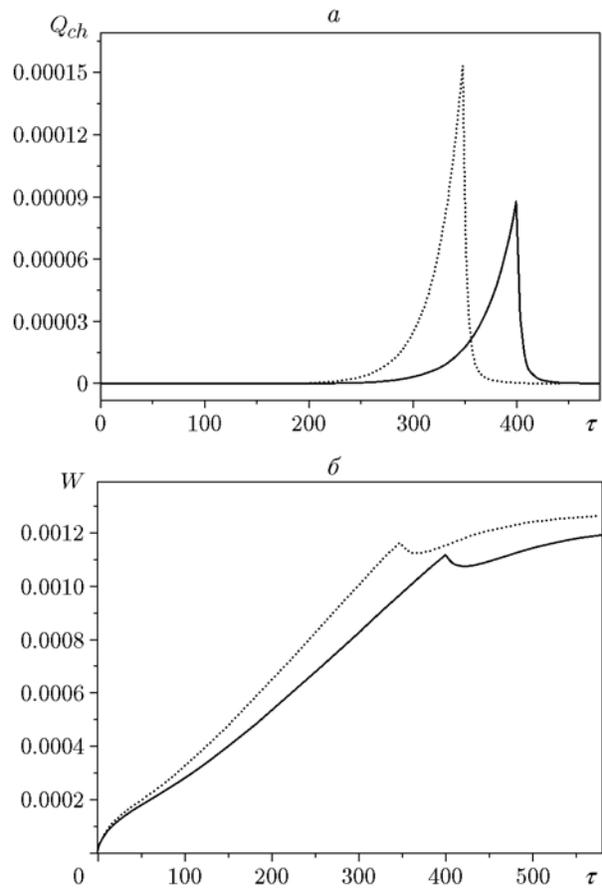


Рис. 4. Зависимость полного химического тепловыделения (а) и запаса тепла в прогревом слое (б) от времени:

пунктирная линия — $K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 4$, $\tau_0 = 350$,
сплошная линия — $K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 3$, $\tau_0 = 400$

выше в случае более короткого импульса нагрева в связи с тем, что в этой ситуации в инертные материалы было отведено меньше тепла, выделенного в ходе химической реакции. Тем не менее инертные материалы, независимо от длительности теплового импульса, накапливают тепло, которое после отключения источника нагрева отводится в реагирующий слой, что объясняет увеличение запаса тепла, неочевидное на первый взгляд. Характер изменения избытка энтальпии со временем не отличается от характера изменения запаса тепла в прогретом слое.

В том случае, когда тепла, запасенного за время действия импульса, достаточно для самоподдерживающегося режима реакции, достигают максимальных значений и запас тепла, и энтальпия. Затем энтальпия выходит на некоторое стационарное значение, зависящее от соотношения теплофизических свойств соединяемых материалов и реагента, а также от параметров, характеризующих реакцию (рис. 5, б). Полное химическое тепловыделение также достигает максимума (рис. 5, а). Стрелками на рис. 6 показано время зажигания, которое было определено по условию $\eta \geq 0.95$ в точке, где $\theta = \theta_{\max}$. В целом, отличие от известных результатов связано именно с влиянием соединяемых материалов.

2.3. Режимы распространения реакции

В зависимости от соотношения теплофизических свойств материалов, между которыми находится реагент, и свойств самого реагента наблюдаются различные температурные профили, ширина зоны реакции, скорости распространения зоны превращения.

Различный характер развития процесса иллюстрирует рис. 6.

Если более высокой теплопроводностью обладают соединяемые материалы, то, прогреваясь, они становятся источником тепла для реакционной смеси и могут способствовать устойчивому распространению реакционного фронта (рис. 6, а). Если соединяемые материалы обладают низкой теплопроводностью, они способствуют увеличению потерь тепла из зоны реакции, что существенно замедляет процесс (рис. 6, б). Если свойства соединяемых материалов существенно различны, то формирование шва происходит в несимметричных условиях. На рис. 6, в слой В имеет более высокую теплопроводность, что приводит к смещению

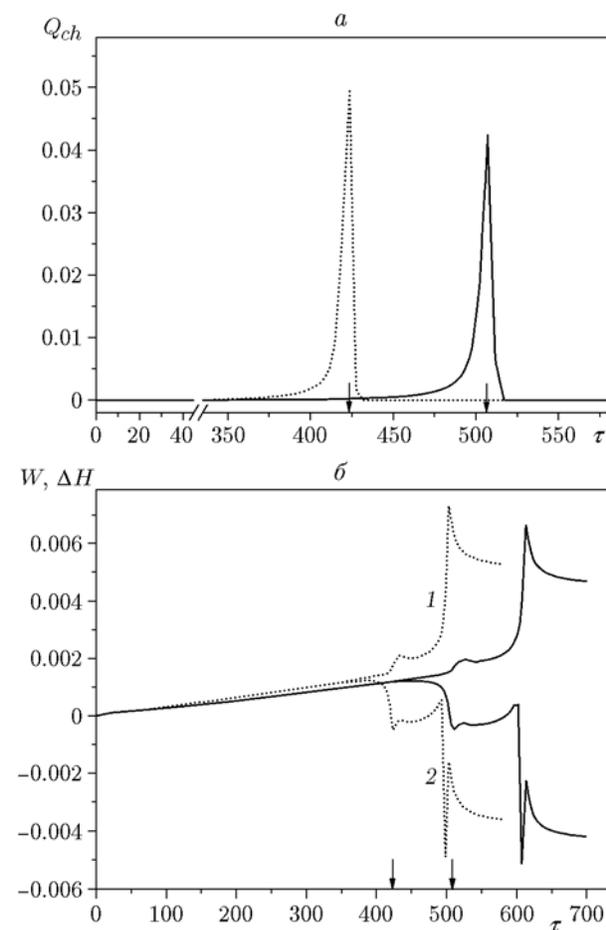


Рис. 5. Зависимость полного химического тепловыделения (а), запаса тепла в прогретом слое (б, кривые 1) и избытка энтальпии (б, кривые 2) от времени:

пунктирная линия — $K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 4$, $\tau_0 = 420$,
сплошная линия — $K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 3$, $\tau_0 = 505$

максимальной температуры к границе раздела $\eta = 1$, что хорошо видно на установившейся стадии. Еще большая несимметрия наблюдается, если различны не только теплопроводности, но и теплоемкости (рис. 6, г).

В данном случае рассматривалась реакция, протекающая в условиях постоянно действующего источника тепла. Наличие самоподдерживающегося режима и зависимость времени зажигания от длительности действия импульсного источника тепла продемонстрированы в [31].

Что касается режимов реакции, то в первом и третьем случаях, отображенных на рис. 6, а, в, режим превращения стационарный. Скорость распространения фронта реакции

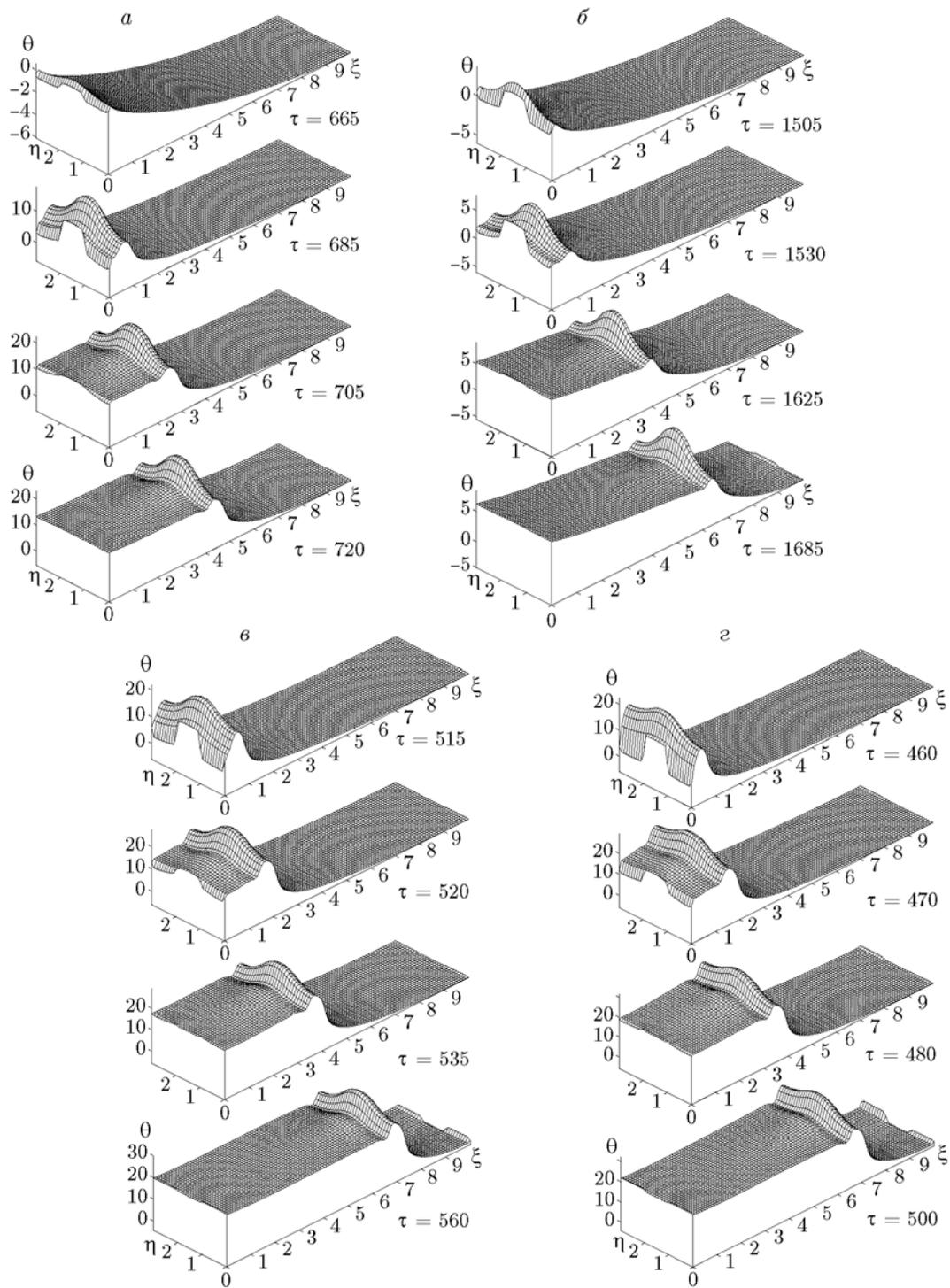


Рис. 6. Качественное распределение температуры в различные моменты времени при распространении реакции между инертными материалами:

$\beta = 0.03, \gamma = 0.03, \theta_0 = 10, Fr = 20$; а — $K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 2.5, K_{cA} = K_{cB} = 1$; б — $K_{\lambda A} = K_{\lambda B} = 1, K_{cA} = K_{cB} = 1.5$; в — $K_{\lambda A} = 5, K_{\lambda B} = 7, K_{cA} = 1, K_{cB} = 1$; з — $K_{\lambda A} = 5, K_{\lambda B} = 7, K_{cA} = 0.4, K_{cB} = 1$

для третьего набора параметров (более высокая теплопроводность инертных материалов по сравнению с первым рассматриваемым образцом) немного выше. Замечено, что наименьшая средняя скорость распространения реакционного фронта среди выбранных наборов параметров наблюдается во втором случае, когда теплоемкость соединяемых материалов выше по сравнению с теплоемкостью реагента, так как в этом случае тепло, выделенное в результате химической реакции, интенсивно отводится в соединяемые материалы, замедляя распространение реакции.

Ширина фронта реакции в стационарных режимах (см. рис. 6, а, в) является величиной постоянной и приблизительно равной в обоих случаях. Для набора параметров, соответствующего рис. 6, б, средняя ширина фронта реакции существенно больше.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследованы характеристики стадии зажигания и режимов горения при иницировании реакции тепловым импульсом в плоском слое, ограниченном инертными материалами с разными свойствами. В результате исследования установлено, что 1) время зажигания зависит от линейных размеров области, занятой реагентом, только до тех пор, пока размер реагента сравним с размером прогретой зоны; 2) теплоемкость и теплопроводность инертных материалов существенно влияют на время зажигания. Эти результаты свидетельствуют о непротиворечивости предложенной модели по сравнению с известными. Обнаружено, что 3) в условиях сопряженного теплообмена происходит аккумуляция тепла в прогретом слое и наблюдается избыток энthalпии, как и при иницировании реакции в полубесконечном слое, зона реакции расширяется в случае соединения материалов с высокой теплопроводностью; 4) возможны стационарные режимы превращения как в симметричных, так и в несимметричных условиях теплообмена, связанных с различием теплофизических свойств инертных материалов, между которыми иницируется реакция. Это следует учитывать при изучении формирования переходных зон при соединении разнородных материалов. Однако, поскольку в конденсированной фазе скорость переноса тепла на порядки величины выше скорости диффузии, которая

определяет формирование переходных зон между соединяемыми материалами и соединительным составом, последние, по-видимому, формируются на стадии остывания. Для описания таких процессов требуются дополнительные исследования. Кроме того, пространственные масштабы для диффузионных процессов много меньше размера зон прогрева, что опять же требует привлечения специальных подходов, например многомасштабных или многоуровневых моделей, которые к тому же должны быть связанными. В дальнейшие планы авторов входит разработка подобных моделей для конкретных технологических ситуаций.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Morsi K.** The diversity of combustion synthesis processing: a review // *J. Mater. Sci.* — 2012. — V. 47. — P. 68–92.
2. **Varma A., Rogachev A. S., Mukasyan A. S., Hwang S.** Combustion synthesis of advanced materials: principles and applications // *Adv. Chem. Eng.* — 1998. — V. 24. — P. 79–226.
3. **Liu G., Li J., Chen K.** Combustion synthesis of refractory and hard materials: a review // *Intern. J. Refract. Metals Hard Mater.* — 2013. — V. 39. — P. 90–102.
4. **Merzhanov A. G., Borovinskaya I. P.** Historical retrospective of SHS: an autoreview // *Intern. J. Self-Propag. High-Temper. Synth.* — 2008. — V. 17, N 4. — P. 242–265.
5. **Wu W. W., Gubarevich A. V., Wada H., Odawara O.** NiO—Al combustion synthesis as applied to joining Al₂O₃ ceramics // *Intern. J. Self-Propag. High-Temper. Synth.* — 2012. — V. 21, N 2. — P. 146–150.
6. **Kimata T., Uenishi K., Ikenga A., Kobayashi K. F.** Dissimilar joining of nickel aluminide with spheroidal graphite cast iron and Cu alloy by hot pressing // *Sci. Technol. Adv. Mater.* — 2004. — V. 5. — P. 251–254.
7. **Zhu W., Wu F., Wang B., Hou E., Wang P., Liu Ch., Xia W.** Microstructural and mechanical integrity of Cu/Cu interconnects formed by self-propagating exothermic reaction method // *Microelectron. Eng.* — 2014. — V. 128. — P. 24–30.
8. **Sychev A. E., Vadchenko S. G., Kamynina O. K., Sachkova N. V.** Simultaneous synthesis and joining of a Ni—Al-based layer to a Mo foil by SHS // *Intern. J. Self-Propag. High-Temper. Synth.* — 2009. — V. 18, N 3. — P. 213–216.
9. **Colombini E., Rosa R., Peronesi P., Cavallini M., Poli G., Leonelli C.** Microwave ignited combustion synthesis as a joining technique for dissimilar materials: Modeling and experimental results // *Intern. J. Self-Propag. High-Temper. Synth.* — 2012. — V. 21, N 1. — P. 25–31.

10. Li Sh., Duan H., Liu Sh., Zhang Y., Dang Z., Zhang Y., Wu Ch. Interdiffusion involved in SHS welding of SiC ceramic to itself and to Ni-based superalloy // Intern. J. Refract. Metals Hard Mater. — 2000. — V. 18. — P. 33–37.
11. Mukasyan A. S., White J. D. E. Combustion joining of refractory materials // Intern. J. Self-Propag. High-Temper. Synth. — 2007. — V. 16, N 3. — P. 154–168.
12. Lin Y.-Ch., McGinn P. J., Mukasyan A. S. High temperature rapid reactive joining of dissimilar materials: Silicon carbide to aluminium alloy // J. Eur. Ceram. Soc. — 2012. — V. 32. — P. 3809–3818.
13. White J. D. E., Simpson A. H., Steinberg A. S., Mukasyan A. S. Combustion joining of refractory materials: Carbon-carbon composites // J. Mater. Res. — 2008. — V. 23, N 1. — P. 160–169.
14. Князева А. Г., Чащина А. А. Численное исследование задачи о тепловом воспламенении в толстостенном сосуде // Физика горения и взрыва. — 2004. — Т. 40, № 4. — С. 67–73.
15. Чащина А. А., Князева А. Г. Влияние плавления инертного наполнителя на воспламенение реакционной смеси в толстостенном сосуде // Горение и плазмохимия. — 2005. — Т. 3, № 4. — С. 331–340.
16. Чащина А. А., Князева А. А. Режимы распространения твердофазной реакции в щели между двумя инертными пластинами // Физ. мезомеханика. — 2004. — Т. 7, спец. вып., ч. 1. — С. 82–85.
17. Князева А. Г., Чащина А. А. Режимы соединения материалов с использованием синтеза в твердой фазе // Химия в интересах устойчивого развития. — 2005. — Т. 13, № 2. — С. 343–350.
18. Belyaev V. V., Kovalev O. B. Simulation of one method of laser welding of metal plates involving an SHS-reacting powder mixture // Intern. J. Heat Mass Transf. — 2009. — V. 52. — P. 173–180.
19. Чащина А. А. Напряжения в зоне реакции в процессе соединения материалов с использованием синтеза в твердой фазе // Изв. ТПУ. — 2006. — Т. 309, № 5. — С. 107–113.
20. Knyazeva A. G. Mechanical processes modeling in the ignition and combustion of sold energetic materials // Proc. of the Ninth Intern. Workshop on Combustion and Propulsion «Novel Energetic Materials and Applications», Lericci, La Spezia, Italy, 14–18 September, 2003. — P. 29.1–29.16.
21. Князева А. Г., Чащина А. А. О термомеханической устойчивости фронта твердофазного превращения в щели между двумя инертными пластинами // Фундаментальные и прикладные вопросы механики: тр. междунар. науч. конф., Хабаровск, 8–11 октября, 2003. — С. 111–121.
22. Князева А. Г. Твердофазное горение в условиях плоского напряженного состояния. 1. Стационарная волна горения // ПМТФ. — 2010. — Т. 51, № 2. — С. 27–38.
23. Князева А. Г. Твердофазное горение в условиях плоского напряженного состояния. 2. Устойчивость к малым возмущениям // ПМТФ. — 2010. — Т. 51, № 3. — С. 24–31.
24. Князева А. Г. Термомеханическая устойчивость фронта твердофазного превращения к двумерным возмущениям // Вестн. ПермГТУ. Механика. — 2011. — № 4. — С. 88–123.
25. Prokof'ev V. G., Smolyakov V. K. Gasless combustion in two-layer structures: A theoretical model // Intern. J. Self-Propag. High-Temper. Synth. — 2013. — V. 22, N 1. — P. 5–10.
26. Алигожина К. А., Князева А. Г. Исследование устойчивости зажигания при соединении разнородных материалов с использованием синтеза в твердой фазе // Иерархически организованные системы живой и неживой природы: материалы междунар. конф., Томск, 9–13 сентября, 2013. — Томск: ИФПМ, 2013. — С. 398–401.
27. Вилюнов В. Н. Теория зажигания конденсированных веществ. — Новосибирск: Наука, 1984.
28. Knyazeva A. G., Aligozhina K. A. Modeling of the heat and kinetic phenomena accompanying the different material joining using solid-phase synthesis // Adv. Mater. Res. — 2014. — V. 1040. — P. 519–524.
29. Баклан С. И., Дик И. Г., Вилюнов В. Н. К вопросу о критерии устойчивости зажигания конденсированного вещества // Физика горения и взрыва. — 1989. — Т. 25, № 1. — С. 12–16.
30. Князева А. Г., Зарко В. Е. Численное моделирование переходных процессов при зажигании двухкомпонентных топлив интенсивными тепловыми потоками // Физика горения и взрыва. — 1993. — Т. 29, № 3. — С. 16–20.
31. Алигожина К. А., Князева А. Г. Численное исследование теплофизических процессов, сопровождающих твердофазный синтез слоистого композита // Сб. докл. XXXI Сиб. теплофиз. семинара, Новосибирск, 17–19 ноября, 2014. — С. 143–145.

Поступила в редакцию 1/VI 2016 г.,
в окончательном варианте — 14/XI 2016 г.