

ФРОНТАЛЬНЫЙ РЕЖИМ ЭКЗОТЕРМИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ТУГОПЛАВКИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СОСТАВОВ

К. Г. Шкадинский, Н. И. Озерковская, В. В. Чернецова

Институт структурной макрокинетики РАН, 142432 Черногловка

Рассмотрена математическая модель распространения фронта горения гетерогенных конденсированных составов, для которых адиабатическая температура горения ниже температуры плавления исходных реагентов и конденсированных продуктов, а также ниже минимальной температуры их эвтектики. Химическое взаимодействие во фронте горения осуществляется путем газотранспортного механизма, который обеспечивается за счет газификации примесных оксидов. В рамках исследованной модели получены значения скорости распространения фронта порядка экспериментально наблюдаемых. Периодические нестационарные режимы горения (пульсирующий и спиновый) возникают при сильной активированности макрокинетики химического превращения. Показано, что активированность может зависеть от энергии газификации, и, следовательно, испарение примесных оксидов влияет на устойчивость стационарного режима горения.

ВВЕДЕНИЕ

Рассматривается процесс горения пористых составов, температура плавления компонентов которых, а также их возможных эвтектик выше температуры горения. В этом случае горение не сопровождается существенным (в макроскопическом плане) плавлением или газификацией, за что и получило название «твердого пламени» [1]. Один из возможных механизмов химического взаимодействия во фронте горения — реакционная диффузия (см. обзор [2]). С другой стороны, в исходном составе имеется незначительная доля примесей (например, окислы), которых после их испарения может оказаться достаточно, чтобы поддержать газотранспортный механизм процесса горения. Трудности проведения прямых экспериментальных измерений, неполнота данных по кинетике и теплофизике процессов, а также исключительная сложность структуры гетерогенного состава не позволяют сделать строгие выводы в пользу какого-либо одного механизма.

Ниже на примере системы $Mo + V$ рассмотрена математическая модель «твердого пламени» с газотранспортным механизмом химического взаимодействия на микроуровне. Модель базируется на результатах экспериментальных исследований [3–5]. Показано, что горение на основе газотранспортного механизма возможно с экспериментально наблюдаемыми скоростями распространения. Выявлены некоторые макроскопические закономерности и за-

висимости, обусловленные особенностями процессов на микроуровне.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим исходный пористый состав как некоторую химически активную сплошную среду с усредненными характеристиками. На данном этапе модель подобна традиционно используемой модели безгазового горения [6]:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - Q_V \frac{\partial V}{\partial t}. \quad (1)$$

Здесь c — теплоемкость, ρ — плотность, T — температура, t — время, λ — коэффициент теплопроводности, x — координата вдоль горящего образца, Q_V — тепловой эффект, отнесенный к единице массы прореагировавшего бора (V).

Для описания кинетики химического взаимодействия не ограничимся макроуровнем, а будем опираться на закономерности, происходящие на микроуровне. Для этого построим еще одну модель динамики процессов химического взаимодействия с учетом тепловой гомогенности в масштабах микроуровня. Исходная гетерогенная среда состоит из двух пространственно разделенных компонентов. Введем понятие характерного расстояния между этими компонентами, обозначив его l . Существуют контакты между реагентами, однако площадь их соприкосновения и коэффициенты твердофазной диффузии малы, и, следовательно, этим можно пренебречь. Для округлых частиц реа-

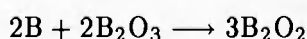
гентов характерное расстояние l порядка радиуса частиц. Введем также понятие эффективной поверхности взаимодействия S . Эта поверхность разделяет исходные реагенты. Перпендикулярно к ней направлен поток одного реагента к другому посредством диффузионных потоков летучих оксидов. Произведение площади данной поверхности S на l пропорционально пористости. Воспользовавшись экспериментальной информацией [4, 5], ограничимся описанием диффузионных потоков для оксидов $B_2O_{3(g)}$ и B_2O_2 .

Диффузионный транспорт будем моделировать в одномерном приближении, определяя потоки летучих оксидов между двумя твердыми поверхностями (бора и молибдена), расстояние между которыми полагается равным l . Микроординату для описания этих потоков обозначим через y . Тогда

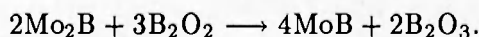
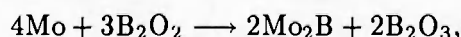
$$\frac{\partial}{\partial t}[B_2O_3] = \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial}{\partial y} [B_2O_3] \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[B_2O_2] = \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial}{\partial y} [B_2O_2] \right), \quad (3)$$

где D — коэффициент диффузии газообразных оксидов в аргоне. Этот инертный газ обычно используется, когда эксперименты проводят не в вакууме. Летучие оксиды вступают в химическое взаимодействие с твердыми реагентами на поверхности бора:



и на поверхности молибдена:



Возникающие в ходе такого взаимодействия градиенты концентраций создают диффузионные потоки между конденсированными реагентами. Рассматривая взаимодействие в элементарном объеме, нужно учитывать, что скорость диффузионного переноса пропорциональна площади удельной эффективной поверхности взаимодействия в этом объеме:

$$SD \frac{\partial}{\partial y} [B_2O_3]_B = -\mu_1 \frac{\partial B}{\partial t} + \mu_5 \frac{\partial m}{\partial t}, \quad (4)$$

$$SD \frac{\partial}{\partial y} [B_2O_3]_{Mo} = -\mu_4 \left(\mu_2 \frac{\partial Mo}{\partial t} - \mu_3 \frac{\partial MoB}{\partial t} \right), \quad (5)$$

$$SD \frac{\partial}{\partial y} [B_2O_2]_B = \mu_0 \frac{\partial B}{\partial t}, \quad (6)$$

$$SD \frac{\partial}{\partial y} [B_2O_2]_{Mo} = \mu_2 \frac{\partial Mo}{\partial t} - \mu_3 \frac{\partial MoB}{\partial t}. \quad (7)$$

Здесь наряду с механизмом гетерогенного химического взаимодействия присутствует поток оксида B_2O_3 в газовую фазу за счет испарения примесей конденсированных оксидов; μ_i — стехиометрические коэффициенты. Законы химического взаимодействия описываются уравнениями гетерогенной кинетики:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = -k_{01} \exp \left(-\frac{E_1}{RT} \right) S_B [B_2O_3]_B, \quad (8)$$

$$\frac{\partial Mo}{\partial t} = -k_{02} \exp \left(-\frac{E_2}{RT} \right) S_{Mo} [B_2O_2]_{Mo}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial MoB}{\partial t} = k_{03} \exp \left(-\frac{E_3}{RT} \right) S_{Mo_2B} [B_2O_2]_{Mo}. \quad (10)$$

Кинетические уравнения учитывают экспоненциальную зависимость скорости реакции от температуры (закон Аррениуса), а также ее пропорциональность удельной поверхности конденсированных и концентрации газовых реагентов.

Скорость испарения оксида $B_2O_{3(l)}$ зависит от температуры, площади открытой поверхности и разности парциальных давлений газообразного оксида вблизи поверхности испарения и вблизи реагирующих поверхностей:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \begin{cases} -DS_i \beta ([B_2O_3]_p - [B_2O_3]_B) / r_0, & m > 0, \\ 0, & m \leq 0, \end{cases} \quad (11)$$

где β — параметр, S_i — удельная поверхность испарения, r_0 — радиус частиц, $[B_2O_3]_p$ определяется по закону Клапейрона — Клаузиуса:

$$[B_2O_3]_p = \begin{cases} [B_2O_3]_{кр} \exp \left(-\frac{Q_i(T_{кр} - T)}{RTT_{кр}} \right), & T < T_{кр}, \\ [B_2O_3]_{кр}, & T \geq T_{кр}. \end{cases}$$

Рассмотрим процесс нестационарного горения цилиндрического образца с бронированной боковой поверхностью длиной L , зажигание которого осуществляется с торца высокотемпературным источником. Все это соответствует следующим начальным и краевым условиям для математической модели:

$$t = 0, \quad 0 < x < L, \quad 0 < y < l:$$

$$T(t, x) = T_0, \quad B(t, x) = B_0, \quad Mo(t, x) = Mo_0, \\ m(t, x) = m_0, \quad MoB(t, x) = 0, \quad Mo_2B(t, x) = 0,$$

$$\begin{aligned}
[B_2O_3](t, x, y) = 0, \quad [B_2O_2](t, x, y) = 0; \quad (12) \\
t > 0, \quad x = 0, \quad 0 < y < l: \quad T(t, 0) = T_w; \\
x = L, \quad 0 < y < l: \quad T'_x(t, L) = 0.
\end{aligned}$$

Рассмотрим установившиеся режимы горения, которые «забыли» стадию зажигания и «не реагируют» на медленные изменения исходного состава, происходящие при начальной температуре. Это могут быть режимы стационарного горения или пульсирующие динамические режимы. Температура продуктов горения, устанавливающаяся за фронтом в адиабатических условиях, равна

$$T_r = T_0 + Q_B(B_0 - B_g)/c\rho,$$

где B_g — количество непрореагировавшего бора (если в исходной среде молибдена меньше, чем положено по стехиометрии).

ОСОБЕННОСТИ ПРИБЛИЖЕННЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Для рассматриваемых процессов горения типично существенное различие характерных пространственных размеров. Эти размеры варьируются при изменении начальной температуры, концентрации, условий взаимодействия. Аналогичная картина наблюдается для временных характеристик. Успешное преодоление возникающих при этом проблем возможно на пути использования численных методов, адаптирующихся к конкретным условиям динамики процесса. При решении данной задачи использован специально разработанный новый алгоритм построения пространственно-временной разностной сетки, адаптирующейся к особенностям решения. Для аппроксимации дифференциальных уравнений применяли неявные устойчивые балансные разностные схемы. Сильная чувствительность процесса к малым массам примесей потребовала высокой точности при расчете концентрации оксидов. Все вышеуказанные факторы, фактическая пространственная двумерность и нестационарность делают анализ математической модели достаточно сложным и трудоемким.

С другой стороны, существенный разброс определяющих характеристик приводит к появлению малых параметров и позволяет использовать асимптотические методы исследования. Применение таких методов позволило в предельных случаях упростить исходную модель и получить ее приближенное аналитическое описание.

ПРЕДЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ГОРЕНИЯ, ЛИМИТИРУЕМЫЙ КИНЕТИКОЙ ПРЕВРАЩЕНИЯ БОРА

Эксперименты, описанные в [5], указывают, что скорость взаимодействия B_2O_2 на границе с молибденом очень высока. Ограничимся анализом лимитирующей стадии взаимодействия бора с B_2O_3 . Скорость гетерогенного взаимодействия B_2O_2 с молибденом и Mo_2B высокая, а диффузия не лимитирует процесса. Отсюда следует, что концентрация B_2O_2 чрезвычайно мала. Также учтем тот факт, что из-за малости начальной массы оксидов по сравнению с массой молибдена первым расходуется B_2O_2 . С другой стороны, из условия сохранения массы кислорода в системе можно утверждать, что весь кислород сосредоточен в B_2O_3 , и определить концентрацию B_2O_3 через начальную концентрацию оксида $[B_2O_3]_0$. Для простоты рассмотрим случай, когда в зоне реакции все оксиды, имеющиеся в качестве микропримеси, перешли в газовую фазу. В результате для модели на микроуровне получаем $[B_2O_3] = [B_2O_3]_0$. При этом макрокинетический закон химического взаимодействия упрощается:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \begin{cases} -[B_2O_3]_0 k_{01} S_B \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right), & B > 0, \\ 0, & B = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Совместно с уравнением (1) уравнение (13) образует хорошо известную модель безгазового горения [6]. В случае высокой активированности процесса химического взаимодействия можно методом «узкой зоны реакции» получить приближенное аналитическое выражение для скорости распространения фронта горения:

$$u^2 = \frac{2\lambda RT_r^2 [B_2O_3]_0 k_{01} S_B \exp(-E_1/RT_r)}{E_1 Q_B (B_0 - B_g)^2}. \quad (14)$$

На рис. 1 приведена структура фронта, отвечающая этому предельному режиму, но рассчитанная по общей модели (1)–(12). Расчеты проведены для следующих значений параметров: $T_0 = 300$ К, $T_r = 1950$ К, $T_{кр} = 1000$ К, $l = 2,5 \cdot 10^{-7}$ м, $L = 8 \cdot 10^{-2}$ м, $D = 8 \cdot 10^{-2}$ м²/с, $c = 404$ Дж/(кг·К), $\rho = 4546$ кг/м³, $\lambda = 10,3$ Дж/(м·с·К), $Q_B = 7,1 \cdot 10^4$ Дж/моль, $S_B = S_{Mo} = S_{Mo_2B} = 1,0$, $Mo_0 = B_0 = 4,24 \cdot 10^4$ моль/м³, $E_{исп} = 3,45 \cdot 10^5$ Дж/моль, $\mu_0 = 1/54$, $\mu_1 = 1/70$, $\mu_2 = 0,5/54$, $\mu_3 = 0,5/54$, $\mu_4 = 54/70$, $\mu_5 = 10^{-5}$, $m_0 = 0,001$ моль/м³,

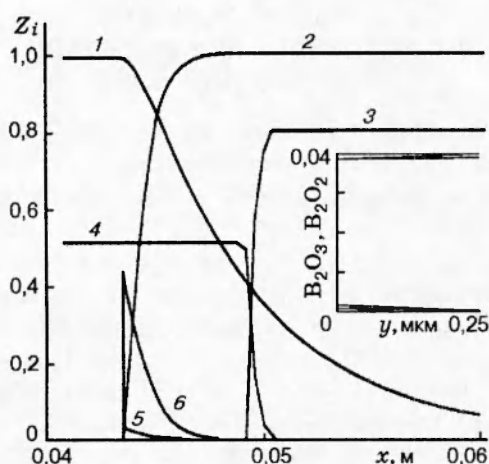


Рис. 1. Структура фронта для предельного режима горения, лимитируемого кинетикой превращения бора:

1 — распределение поля температуры во фронте горения, $Z_1 = (T - T_0)/(T_r - T_0)$; 2 — глубина превращения бора, $Z_2 = V/V_0$; 3 — процесс испарения $B_2O_{3(l)}$, $Z_3 = 0,8 \cdot B_2O_{3(l)}/m_0$; 4 — концентрация $B_2O_{3(g)}$ вблизи поверхности бора, $Z_4 = 0,013 \cdot B_2O_{3(g)}/m_0$; 5 — концентрация B_2O_2 вблизи поверхности бора, $Z_5 = 0,38 \cdot B_2O_{2(g)}/m_0$; 6 — источник тепловыделения, $Z_6 = 4,46 \cdot B'_t/(B_0 \cdot k_{01})$

$E_1 = 1,3 \cdot 10^5$ Дж/моль, $k_{01} = 10$ с $^{-1}$, $E_2 = 0$, $k_{02} = 10^{14}$ с $^{-1}$, $E_3 = 0$, $k_{03} = 10^{14}$ с $^{-1}$.

Кривая 1 на рис. 1 описывает распределение поля температуры во фронте горения. Имеется относительно широкая зона прогрева, где химическим превращением можно пренебречь. Экзотермическое химическое взаимодействие сосредоточено в относительно узкой зоне высоких температур. Источник тепловыделения изображен кривой 6, а кривая 2 представляет изменение концентрации бора во фронте горения (в данном случае $B_g = 0$). Кривая 3 характеризует процесс испарения конденсированного оксида $B_2O_{3(l)}$. Кривыми 4 и 5 обозначены соответственно концентрации $B_2O_{3(g)}$ и B_2O_2 вблизи поверхности бора. Их пространственно-временное распределение при прохождении фронта горения через элемент гетерогенной среды представлено на вставке рис. 1. В данном случае градиенты концентраций B_2O_2 и B_2O_3 малы, мала также и доля B_2O_2 по отношению к B_2O_3 .

Конечно, описанная предельная структура фронта остается схематичной, и реальное горение много сложнее. Для этого достаточно заметить, что считающиеся в модели посто-

янными поверхности реагентов и поверхность взаимодействия в реальном горении — меняющиеся величины. Концентрация примесного газообразного оксида может быть не постоянной, а определяться, например, законами равновесного испарения. В этом случае концентрация экспоненциально зависит от температуры. В макрокинетическом описании химического взаимодействия брутто-энергия активации будет учитывать как энергию активации процесса химического превращения бора, так и активированность процесса испарения.

ПРЕДЕЛЬНЫЙ РЕЖИМ ГОРЕНИЯ, ЛИМИТИРУЕМЫЙ ДИФфуЗИОННЫМ ТРАНСПОРТОМ

Для сильно активированного химического гетерогенного взаимодействия переход от кинетического режима к диффузионному происходит в узком интервале температур. Обозначим температуру этого перехода через T_i . При более высоких температурах диффузионный транспорт выходит на квазистационарный режим, при котором можно пренебречь временем установления диффузионных потоков. Тем не менее диффузионный поток остается зависимым от времени ввиду временного изменения скорости гетерогенного взаимодействия. По-прежнему будем рассматривать случай высоких скоростей взаимодействия на поверхности молибдена (следовательно, $[B_2O_2]_{Mo} \approx 0$). Для диффузионного режима подобное приближение реализуется на поверхности бора: $[B_2O_3]_B \approx 0$. Для простоты ограничимся анализом случая, когда примесные окислы полностью переходят в газовую фазу. Из условия кислородного баланса в системе общая доля газообразных окислов лимитируется их начальным содержанием. Используя линейность квазистационарных концентрационных профилей окислов между твердыми компонентами, получим простую аппроксимацию для скорости химического превращения:

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \begin{cases} -SD \frac{[B_2O_3]_0}{\mu_{1l}} = -K, & T_r \geq T \geq T_i, \\ 0, & T > T_r, \quad T < T_i. \end{cases} \quad (15)$$

Проинтегрировав диффузионное уравнение для $[B_2O_3]$, учитывая, что масса примеси мала и взаимодействие квазистационарно, получим соотношение между диффузионным по-

током и скоростью гетерогенного взаимодействия:

$$SD([B_2O_3]_0 - [B_2O_3]_B)/l = \mu_1[B_2O_3]k_{01}S_B \exp(-E_1/RT).$$

Из этого соотношения получим приближенное значение концентрации

$$[B_2O_3]_B = \frac{[B_2O_3]_0}{1 + \mu_1 l k_{01} S_B \exp(-E_1/RT)/DS}$$

и определим T_i как температуру перехода кинетического режима превращения в диффузионный:

$$\mu_1 l k_{01} S_B \exp(-E_1/RT_i) = DS. \quad (16)$$

Проанализируем тепловую модель для упрощенного кусочно-постоянного источника тепловыделения. В системе координат, связанной с движущимся с постоянной скоростью u фронтом, уравнения (1) и (15) примут вид (здесь $T(x, t) = T(x + ut) = T(z)$):

$$u\sigma\rho T'_z = \lambda T''_{zz} + Q_B K \quad \text{для } T \in [T_i, T_r],$$

$$u\sigma\rho T'_z = \lambda T''_{zz} \quad \text{для } T \notin [T_i, T_r].$$

Решая аналитически эти уравнения и удовлетворяя начальным условиям и условиям сопряжения (равенство температур и потоков), получим соотношение для определения скорости горения:

$$-\frac{(u\sigma\rho)^2(T_r - T_0)}{\lambda K Q_B} = \ln \left(1 - \frac{(u\sigma\rho)^2(T_i - T_0)}{\lambda K Q_B} \right). \quad (17)$$

Введем

$$w^2 = \frac{(u\sigma\rho)^2(T_r - T_0)\mu_1 l}{\lambda Q_B S D [B_2O_3]_0}. \quad (18)$$

Из (17) и (18) следует простое трансцендентное соотношение для определения w^2 (а следовательно, скорости распространения фронта), которое имеет единственное решение и легко определяется итерационным способом:

$$1 - \frac{T_i - T_0}{T_r - T_0} w_n^2 = \exp(-w_{n-1}^2),$$

где n — индекс итерации. В качестве нулевого приближения возьмем

$$w_0^2 = \frac{T_r - T_0}{T_i - T_0}.$$

Элементы структуры фронта горения описанного предельного режима представлены на рис. 2. Они получены численным расчетом полной математической модели для следующих параметров: $D = 10^{-2}$ м²/с, $l = 10^{-6}$ м, $E_1 =$

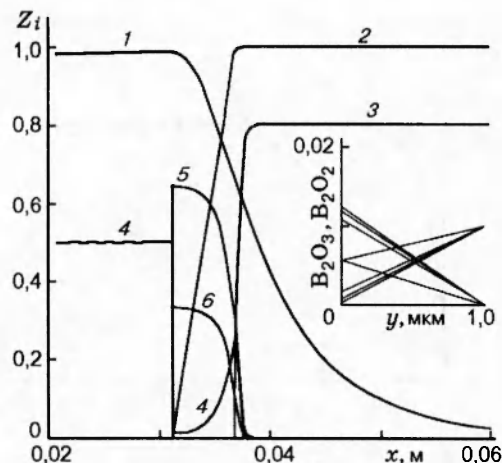


Рис. 2. Структура фронта для предельного режима горения, лимитируемого диффузией:

1 — распределение поля температуры во фронте горения, $Z_1 = (T - T_0)/(T_r - T_0)$; 2 — глубина превращения бора, $Z_2 = B/B_0$; 3 — процесс испарения $B_2O_{3(l)}$, $Z_3 = 0,8 \cdot B_2O_{3(l)}/m_0$; 4 — концентрация $B_2O_{3(g)}$ вблизи поверхности бора, $Z_4 = 0,05 \cdot B_2O_{3(g)}/m_0$; 5 — концентрация B_2O_2 вблизи поверхности бора, $Z_5 = 0,05 \cdot B_2O_{2(g)}/m_0$; 6 — источник тепловыделения, $Z_6 = 292 \cdot B'_i/(B_0 \cdot k_{01})$

$1,47 \cdot 10^5$ Дж/моль, $k_{01} = 140$ с⁻¹, $T_{кр} = 1500$ К. Пространственно-временное распределение концентраций в элементарной ячейке гетерогенного состава при прохождении фронта отражено на вставке рисунка. Здесь градиенты в газовой фазе существенны, но видно, что процесс идет в квазистационарном режиме (распределение линейно). Источник тепловыделения в первом приближении можно аппроксимировать кусочно-постоянной функцией. Его правая сторона сглажена, при увеличении энергии активации зона сглаживания уменьшается.

АНАЛИЗ НЕКОТОРЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ОБЩЕЙ МОДЕЛИ

В общем случае для параметров рассматриваемой системы $Mo + B \rightarrow MoB$ количественно можно показать возможность распространения высокотемпературного синтеза в форме самоподдерживающегося фронта. Варьирование параметров в разумном диапазоне приводило к получению скоростей распространения фронта, соответствующих экспериментально наблюдаемым.

Расчеты также показали, что достаточно малой доли примесных газифицирующих оксидов, чтобы поддержать газотранспортный

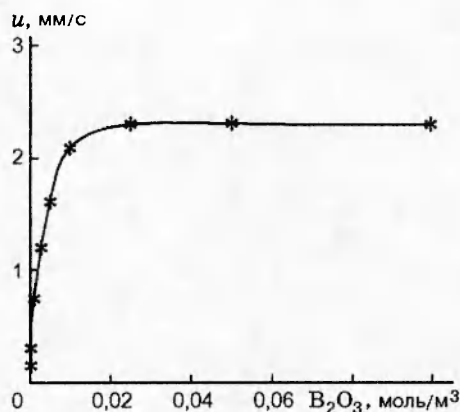


Рис. 3. Зависимость скорости горения u от начальной концентрации B_2O_3

механизм распространения фронта. Естественно, что сильное снижение концентрации примеси уменьшает скорость распространения и в условиях неадиабатичности должно привести к срыву горения. Однако при незначительном увеличении содержания примеси скорость распространения становится не зависимой от количества примеси (рис. 3).

Таким образом, малая доля газифицирующегося примесного окислителя в состоянии поддержать газотранспортный механизм химического взаимодействия во фронте. Пока масса примеси достаточно мала, чтобы не влиять существенно на термодинамические характеристики (например, на температуру горения), скорость распространения не зависит от добавки. При существенной доле добавки она может выполнять функцию геллового разбавителя, менять скорость испарения и условия взаимодействия. Таким образом, создается эффект чистого твердофазного взаимодействия, не чувствительного к газовым добавкам.

С помощью расчетов по общей математической модели установлено, что распространение фронта горения имеет осциллирующий характер, соответствующий наблюдаемому экспериментально. Однако обнаружена ранее неизвестная зависимость потери устойчивости от параметров испарения (температуры кипения оксида). Повышение температуры кипения в численном эксперименте приводило к переходу от стационарного режима горения к пульсирующему.

На рис. 4 представлена скорость горения образца для двух различных температур кипения (кривые 1 и 3) и при изменении энергии

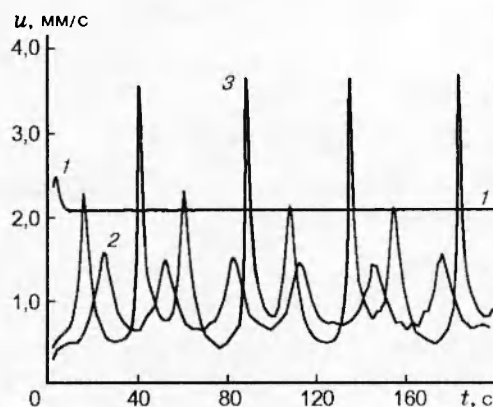


Рис. 4. Зависимость скорости горения от времени:

1 — стационарный режим, $E_1 = 1,3 \cdot 10^5$ Дж/моль, $T_{кр} = 1400$ К; 2 — пульсирующий режим для высоких энергий активации химического взаимодействия, $E_1 = 1,47 \cdot 10^5$ Дж/моль, $T_{кр} = 1400$ К; 3 — пульсирующий режим, определяемый активированностью химического процесса и энергией газификации, $E_1 = 1,3 \cdot 10^5$ Дж/моль, $T_{кр} = 1500$ К

активации химического взаимодействия на частицах бора при постоянной температуре кипения (кривая 2). Виден переход от устойчивого стационарного режима горения к устойчивому динамическому (пульсирующему). Этот переход напоминает обычную потерю устойчивости в рамках модели безгазового горения. Сущность указанной зависимости можно пояснить, опираясь на режим горения, лимитируемый кинетикой превращения бора. Ранее отмечалось, что в этом режиме энергия активации при макрокинетическом описании химического взаимодействия может зависеть от параметров испарения. Увеличение энергии активации является определяющим фактором дестабилизации фронта горения. Если же испарение завершается в зоне прогрева и концентрация оксида не чувствительна к температуре, дестабилизирующее воздействие испарения исчезает.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе построена математическая модель распространения фронта горения смеси тугоплавких реагентов с газотранспортным механизмом химического взаимодействия. Использовали параметры и схему взаимодействия в системе $Mo + B \rightarrow MoB$. Показана возможность самораспространяющегося синтеза на основе газотранспортного механизма на микроуровне за счет малой доли газифицирующихся примесей (оксидов). Рассчитанные ско-

рости горения соответствуют экспериментально наблюдаемым. Путем анализа процессов на микроуровне выявлены интересные макроскопические зависимости, например потеря устойчивости распространения. Вопросы более детального сопоставления результатов исследования модели с экспериментами, а также области применимости модели выходят за рамки данной публикации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мержанов А. Г., Боровинская И. П. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез тугоплавких неорганических соединений // Докл. АН СССР. 1972. Т. 204, № 21. С. 366–369.
2. Хайкин Б. И. К теории процессов горения в гетерогенных конденсированных средах // Процессы горения в химической технологии и металлургии. Черноголовка: ОИХФ АН СССР, 1975. С. 227–244.
3. Бабкин С. Б., Блошенко В. Н., Боровинская И. П. К вопросу о механизме массопереноса при горении СВС-системы $\text{Mo} + \text{B}$ // Физика горения и взрыва. 1991. Т. 27, № 3. С. 74–80.
4. Yuranov I. A., Fomin A. A., Shiryaev A. A., Kashirenin O. E. Chemical model for solid phase gasless combustion of SHS system $\text{Mo} + \text{B}$ // J. Mater. Synthesis and Processing. 1994. V. 2, N 4. P. 239–246.
5. Kashirenin O. E., Yuranov I. A. A DMS kinetic study of the boron oxides vapor in the combustion front of SHS system $\text{Mo} + \text{B}$ // Twenty Fifth Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, PA: The Combustion Inst., 1994. P. 1669–1675.
6. Новожилов Б. В. Скорость распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной фазе // Докл. АН СССР. 1961. Т. 141, № 1. С. 151–153.

Поступила в редакцию 9/IV 1997 г.