

Формирование наноструктуры в реагирующих ультрадисперсных порошковых материалах¹

Еремкина Елена Борисовна, Пронин Максим Викторович, Дмитриева Мария Александровна²

студент, студент, доцент, к.ф.м.-н.

Томский государственный университет, Томск, Россия

E-mail: lopren@sibmail.com

Рассмотрен комплексный критерий реализации неравновесных процессов синтеза наноструктурных композиционных материалов, определяющий необходимые условия формирования наноскопической субструктуры продуктов реакции и саму возможность синтеза на фронте ударного импульса. Критерий запуска неравновесных процессов синтеза объединяет условия малости степени химических превращений, максимальной степени пластического деформирования ультрадисперсных порошковых частиц реагирующих компонентов смеси, выполнения статистического критерия реализации «турбулентного» режима уплотнения [1], изменения агрегатного состояния реагирующей среды. В качестве базовой модели используется многоуровневая модель поведения реагирующей порошковой среды, в рамках которой решаются сопряженные задачи теплового баланса, ударной модификации порошкового тела, фильтрации расплава легкоплавкого компонента и макрокинетики химических превращений [2].

Моделируется нагружение компакта химически реагирующей порошковой смеси Ni-Al-30%NiAl. Выполнение комплексного критерия в микрослоях проверяется на каждом шаге по времени вплоть до окончания действия ударного импульса. Для этого в каждый момент времени параметры, входящие в критерий, усредняются по пространству в пределах фиксированной полосы, состоящей из заданного числа микрослоев. Проведенные вычислительные эксперименты позволяют заключить, что турбулентный режим уплотнения имеет локализованный характер, формируя структуру продукта физико-химических превращений. В ультрадисперсных порошковых реагирующих материалах зоны турбулентного режима динамического уплотнения представляют наиболее вероятные зоны формирования наноразмерных субструктур продукта реакции. Структура локализованных зон неоднородного динамического уплотнения определяется исходной структурой реагирующего порошкового тела – размерами порошковых частиц, средней пористостью и параметрами структуры концентрационной неоднородности.

1. Мещеряков Ю.И. Об управлении физическими механизмами структурообразования при ударном нагружении материалов // Управление в физико-технических системах / Под ред. А.Л. Фрадкова. – СПб.: Наука, 2004. С. 222 - 245.
2. Лейцин В.Н, Дмитриева М.А. Моделирование механохимических процессов в реагирующих порошковых средах – Томск: Изд-во НТЛ, 2006, С. 40.

¹ Тезисы доклады основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта РФФИ (проект №05-08-01377а).

² Авторы выражают признательность профессору, д.ф.-м.н. Лейцину за помощь в подготовке тезисов.