

На правах рукописи

Колмакова Татьяна Витальевна

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ УПЛОТНЕНИИ
ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩИХ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ**

01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Томск – 2005

Работа выполнена в Томском государственном университете.

Научный руководитель	доктор физико-математических наук, доцент Владимир Нояхович Лейцин
----------------------	--

Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Александр Владимирович Герасимов
	кандидат технических наук, доцент Светлана Петровна Буякова

Ведущая организация – Тверской государственный университет.

Защита состоится " __ " _____ 2005 г. в " __ " часов на заседании диссертационного совета Д 212.267.13 при Томском государственном университете по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского государственного университета.

Автореферат разослан " __ " _____ 2005 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
д. ф.-м. н., ст. н. с.

Ю.Ф. Христенко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Методы порошковой металлургии являются перспективными методами получения новых конструкционных и функциональных материалов. Интерметаллические соединения, получаемые в результате прямого синтеза из порошков исходных веществ, являются основой высокотемпературных композиционных материалов конструкционного и инструментального назначения; они перспективны для изготовления различных деталей, работающих при повышенных температурах. Разработка методов исследования закономерностей деформирования реагирующих порошковых материалов при динамическом нагружении, обеспечивающих изучение механического поведения подобных материалов, испытывающих фазовые, структурные и химические превращения, имеет практическую значимость для развития современных технологий получения материалов.

Исследования процессов синтеза химических соединений в дисперсных системах проводились различными группами ученых и связаны с именами А.П. Алдушина, В.В. Александрова, И.П. Боровинской, В.И. Итина, М.А. Корчагина, Ю.М. Максимова, А.Г. Мержанова, Ю.С. Найбороденко, Б.И. Хайкина и др. Многими исследователями экспериментально обнаружена возможность расплава легкоплавкого компонента реагирующей порошковой смеси.

Для реализации определенного режима синтеза, а также самой возможности получения новых материалов определяющим фактором является механическая активация реагирующих компонентов. Исследованию влияния механической активации на взаимодействие компонентов в различных порошковых системах с целью выяснения причин повышения реакционной способности компонентов посвящены работы Е.Г. Аввакумова, С.С. Бацанова, В.В. Болдырева, Ю. А. Гордополова, К.Н. Егорычева, Н.С. Ениколопяна, В.В. Курбаткиной, М.А. Мейерса, В.Ф. Нестеренко, Н.Н. Тадхани, В.С. Трофимова, А.С. Штейнберга и других. При динамическом нагружении реагирующих порошковых компактов основными факторами механической активации можно считать пластическую деформацию кристаллической структуры материала порошковых частиц и удаление оксидных и адсорбированных слоев с поверхности частиц порошковой смеси.

Характерными чертами поведения реагирующих порошковых смесей, подвергнутых интенсивному механическому нагружению, являются многостадийность, многофазность и разнообразие физико-химических процессов. Поведение порошковых материалов при статическом и динамическом нагружениях изучалось в работах М.Ю. Бальшина, П.А. Витязя, Я.Е. Гегузина, Г.М.Ждановича, С.П. Киселева, И.Ф. Мартыновой, В.Ф. Нестеренко, В.Я. Перельмана, В.В. Скорохода, В.Г. Щетинина и других. В. Н. Лейциным разработана концепция моделирования механохимических процессов в реагирующей порошковой среде, позволяющая комплексно учитывать особенности исходной структуры, возможные физические механизмы тепло - и массопереноса, фазовых переходов, релаксации напряжений.

Разнообразие физико-химических явлений, как при СВС, так и при ударном синтезе обусловило развитие комплекса экспериментальных и теоретических методов, направленных на изучение условий и режимов протекания реакций. Методами, позволяющими наблюдать динамику механохимических превращений в реальном масштабе времени, являются методы оптической пирометрии. Эти методы являются бесконтактными и имеют временное разрешение порядка 10^{-8} секунды. Методы яркостной пирометрии широко используются для исследования процессов, происходящих в конденсированных веществах, как при ударном сжатии, так и при СВС. Среди них, например, индикаторный и оконный методы, разработанные группой ученых: М. А. Бражниковым, И. М. Воскобойниковым, М. Ф. Гогулей, А. Ю. Долгобородовым и другими. Измеряемая яркостная температура характеризует интенсивность излучения поверхности исследуемых образцов и может быть источником информации о реализации различных стадий физико-химических превращений, модификаций структуры и многих других параметров модели реагирующего порошкового тела, как на поверхности, так и в глубине материала.

Физико-химические процессы, происходящие в реагирующей порошковой смеси сопровождаются излучением как теплового, так и люминесцентного характера, избыточного над тепловым. Существует множество разновидностей люминесценции, отличающихся способом возбуждения центров люминесценции (атомов, молекул, ионов). Исследование люминесценции началось с работ С. И. Вавилова. Химические превращения в реагирующих порошковых смесях обладают высоким экзотермическим эффектом, что является условием возбуждения хемилюминесценции. Ее интенсивность служит мерой скорости процесса. Разновидностью хемилюминесценции является кандолюминесценция, которая может возникнуть в результате накаливания белых окислов, присутствующих в порошковой смеси. Наличие накаленных белых окислов в реагирующих порошковых системах, формируемых в процессе реакции и оставшихся после очистки поверхностных слоев частиц в результате воздействия динамических нагрузок, может вызвать увеличение интенсивности свечения как во всем видимом диапазоне длин волн, так и только в голубой области спектра. Исследования кандолюминесценции проводились А. Н. Горбань, И. С. Грозиной, В. М. Кудрявцевой, В. А. Соколовым и др. Деформирование и разрушение всех твердых тел сопровождаются световым излучением в видимом диапазоне длин волн, происхождение которого не связано с разогревом образцов. Это явление в получило название «механолюминесценции». Максимум «механолюминесцентного» излучения приходится на красную область спектра. Исследованию механолюминесценции посвящены работы К. Б. Абрамовой, Е. А. Борисовой, В. П. Валицкого, Р. Д. Глебовой, Н. А. Златина, Г. И. Малинина, Б. П. Перегуда, А. А. Платонова, А. Б. Похомова, И. Я. Пухонто, А. И. Русакова, А. А. Семенова, Н. М. Складорова, З. Ф. Федичкиной, И. П. Щербакова, С. Э. Шконды и других.

Сложный характер излучения поверхности образцов реагирующих порошковых материалов в процессе динамического нагружения и механохимических превращений делает актуальным построение физико-математической модели процессов, определяющих излучение поверхности и методики моделиро-

вания процессов, способных вызвать излучение, учитывающей особенности поведения порошковой смеси на всех этапах механохимических превращений. Необходимо исследовать влияние различных параметров на излучение поверхности образца реагирующей порошковой смеси с целью получения информации о характере ее реагирования, закономерностях излучения. Подобные исследования актуальны для интерпретации экспериментальных данных, полученных методами оптической пирометрии.

Цель работы:

Разработка модели, адекватно описывающей физико-механические процессы, вызывающие излучение поверхности химически реагирующего порошкового компакта, подвергнутого динамическому нагружению.

Разработка методики компьютерного моделирования механохимических процессов, способных вызвать излучение поверхности образца реагирующей порошковой смеси, позволяющей учесть особенности формирования структуры, фазовые переходы компонентов смеси, механическую модификацию порошкового материала в процессе динамического нагружения, изменение реакционной способности порошкового материала, возможность фильтрации расплава легкоплавкого компонента смеси на всех этапах механохимических превращений, оценка параметров теплового и люминесцентного излучения.

Исследование влияния различных параметров (амплитуды ударного импульса, степени концентрационной неоднородности, различных параметров структуры поверхности: начальной пористости, размера частиц порошковой смеси и т.д.) на параметры излучения поверхности с целью изучения возможности интерпретации данных, полученных с помощью методов оптической пирометрии в экспериментах по динамическому нагружению реагирующих порошковых материалов.

Научная новизна работы:

Впервые предложена модель излучения поверхности динамически нагруженного реагирующего порошкового тела, учитывающая наличие теплового и люминесцентного излучения, а также определяющие факторы физико-химических процессов в деформируемых твердых реагирующих порошковых телах.

Разработана новая методика теоретического исследования механохимических процессов, вызывающих излучение поверхности образца реагирующей порошковой смеси. Данная методика позволяет получить прогноз изменения яркостной температуры поверхности образца и отделить тепловое излучение от люминесцентного. В люминесцентном излучении различаются хемилюминесценция и механолюминесценция. Для оценки интенсивности хемилюминесцентного излучения используется скорость прироста энтальпии компонентов порошковой смеси на поверхности. Для оценки интенсивности механолюминесценции используется мощность работы разрушения частиц порошковой смеси.

Впервые показано, что параметры люминесцентного излучения: интенсивность, частота пульсации, продолжительность люминесценции и т. п., являются источниками информации о структуре порошкового реагирующего материала, а также о характеристиках физико-химических процессов, сопровож-

дающих химические превращения в динамически нагруженных реагирующих порошковых телах.

Теоретически показано, что характер излучения поверхности порошкового тела отражает закономерности деформирования реагирующей твердой порошковой среды.

Автором выносятся на защиту:

1. Модель механохимических процессов, определяющих излучение поверхности образцов химически реагирующих порошковых материалов, подвергнутых динамическому нагружению.

2. Методика компьютерного моделирования механохимического поведения химически реагирующих порошковых материалов при динамическом нагружении, позволяющая исследовать определяющие факторы теплового и люминесцентного излучения поверхности образцов вместе с параметрами состояния порошковой среды.

3. Утверждение, что характер и интенсивность люминесцентного излучения поверхности порошкового тела несет информацию о структуре приповерхностного слоя, интенсивности и кинетике химических превращений, степени механической активации в каждый момент времени измерения.

4. Утверждение, что излучение образцов с предварительно удаленным приповерхностным слоем, несет информацию о структуре порошкового тела и физико-химических процессах внутри образца.

Апробация работы. Материалы диссертации докладывались и обсуждались на следующих конференциях: XIII Симпозиум по горению и взрыву (Черноголовка, 2005), Международная конференция «Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны» (Саров, 2001), XXVII, XXVIII и XXIX Гагаринские чтения. Международные молодежные научные конференции. (Москва, 2001, 2002, 2003), VII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "IV Сибирская школа молодого ученого" (Томск, ТГПУ, 2001), VII, IX International Scientific and Practical Conferences of Students, Post-graduates and Young Scientists "Modern Techniques and Technology" (Tomsk, Tomsk Polytechnic University, 2001, 2003), XL Международная научная студенческая конференция "Студент и научно-технический прогресс", Физика (Новосибирск, 2002), VI и VII Московские Международные телекоммуникационные конференции студентов и молодых ученых "Молодежь и Наука" (Москва, МИФИ, 2003, 2004), VII International Conference "Computer Aided Design of Advanced Materials and Technologies" (CADAMT' 2003) (Tomsk, Russia, 2003), Международная научная конференция «Фундаментальные и прикладные вопросы механики» (Хабаровск, 2003), Международная конференция "Вычислительные и информационные технологии в науке, технике и образовании" (Усть-Каменогорск, Казахстан, 2003), IV Всероссийская конференция молодых ученых «Физическая мезомеханика материалов» (Томск, 2001), Механика летательных аппаратов и современные материалы: VIII Всероссийская научно-техническая конференция (Томск, 2002), Девятая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых ученых, ВНКСФ-9 (Красноярск, 2003), Всероссийские научно-технические конференции "Физика и химия высокоэнергетических систем" (Томск, ТГУ, 2003,

2004), Всероссийские научные конференции молодых ученых "Наука. Технологии. Инновации" (Новосибирск, 2001, 2002, 2003), Вторая Всероссийская конференция молодых ученых «Материаловедение, технологии и экология в третьем тысячелетии» (Томск, ИФПМ СО РАН, 2003), II, III, IV, V Школы-семинары «Современные проблемы физики и технологии» (Томск, 2001, 2002, 2003, 2004), Четвертая всероссийская конференция «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» (Томск, 2004).

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в 31 печатной работе.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка цитируемой литературы и приложения; содержит 57 рисунков, 16 таблиц, библиографический список из 179 наименований – всего 174 страницы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована практическая значимость и актуальность исследуемой проблемы, сформулированы задачи исследования, перечислены новые результаты, представлены положения, выносимые на защиту, описана структура диссертации.

Первая глава носит обзорный характер. На основе анализа результатов работ, посвященных исследованию проблем синтеза материалов выявлены основные закономерности механохимических превращений в порошковых системах, режимы и условия их протекания. Рассмотрены работы, посвященные исследованию механической активации порошковых материалов. Выявлены основные механизмы активации реагирующих компонентов порошковой смеси, реализующиеся при динамическом нагружении, как в объеме порошкового компакта, так и в приповерхностных слоях образца. Отмечены особенности формирования структуры приповерхностного слоя образца при предварительном прессовании порошкового компакта. Представлена концепция моделирования физико-химических процессов в реагирующих порошковых средах, развитая на кафедре МДТТ ТГУ, позволяющая комплексно учитывать особенности исходной структуры реальной порошковой смеси и возможные физические механизмы тепло- и массопереноса, фазовых переходов, релаксации напряжений и т. п., обеспечивающие эволюцию структурно-фазового состояния смеси и ее реакционной способности. Рассмотрены работы, посвященные бесконтактным методам исследования механохимических процессов в реагирующих порошковых смесях. На основе анализа результатов работ, посвященных исследованию излучения твердых тел, выявлены виды излучений, которые могут реализоваться в результате протекания механохимических процессов в приповерхностных слоях предварительно скомпактированных образцов реагирующих порошковых смесей. Рассмотрены работы, посвященные исследованию хемиллюминесцентного и механолюминесцентного излучения материалов.

Во второй главе диссертации представлены разработанная модель и методика компьютерного моделирования механохимических процессов, способных вызвать излучение поверхности образца реагирующей порошковой смеси.

Используется модель поведения ударно нагруженной реагирующей порошковой смеси, учитывающая наличие макроскопической структуры концентрационной неоднородности, возможность фазовых превращений компонентов, фильтрации расплава легкоплавкого компонента и образование продукта реакции, а также механическую активацию реагирующих компонентов и эволюцию структуры порошкового тела на всех этапах механохимических превращений.

Порошковое тело представляется модельной гетерогенной системой компонентов с детерминированными структурными параметрами, физическими и химическими характеристиками. Предполагается, что концентрационная неоднородность смеси имеет квазипериодическую пространственную структуру. Порошковое тело представляется совокупностью элементов концентрационной неоднородности – реакционных ячеек с размерами $a \times a \times b$ (рис.1, а), б)).

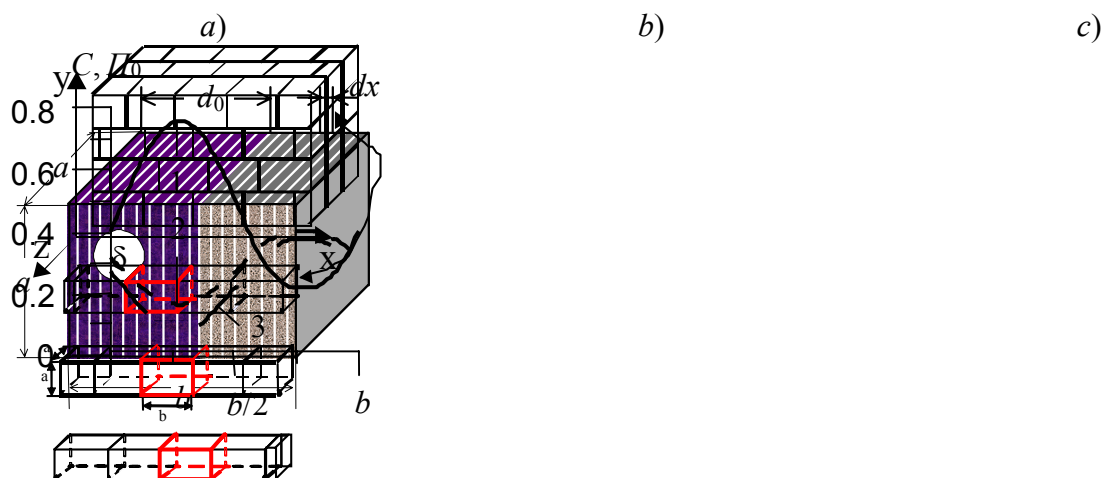


Рис. 1. Геометрическая модель структуры порошкового тела.

По объему элемента макроскопической структуры слоя смеси концентрационная неоднородность задается изменением концентрации компонентов в направлении b , в предположении, что заданная доля легкоплавкого компонента δ сконцентрирована у левой грани ячейки $a \times a$ в ее части размером d_0 , определяемым характерным размером агломератов частиц. В этом случае параметр b/a может служить характеристикой степени концентрационной неоднородности. Пример распределения начальных концентраций компонентов порошковой смеси (линии 1 и 2) и удельного объема пор (линия 3) по толщине реакционной ячейки представлен на рис.1, с). Излучающий приповерхностный слой образца моделируется набором подобластей с различным содержанием компонентов порошковой смеси и пористости (рис. 1, а)), число которых задается распределением по некоторой функции.

Механическое нагружение порошкового тела может привести к механической активации реагирующего компакта за счет пластической деформации кристаллической структуры компонентов, удаления оксидных и адсорбированных слоев с поверхности частиц во время действия ударного импульса. Модификация порошковой смеси в процессе механического нагружения оценивается с использованием энергетического подхода покомпонентно в каждый момент времени действия импульса механического нагружения. Максимальная удельная работа, необходимая для пластического деформирования частиц, определяется как $A_n = C_n \sigma_T \varepsilon_n$, где A_n – работа на пластическую деформацию n -го компонента, C_n –

объемная концентрация n -го компонента, ε_n – предельная деформация n -го компонента. Полагается, что работа пластического течения переходит в тепло. Полная работа, которую необходимо совершить для разрушения поверхностных слоев со всех частиц на микрослое, определяется соотношением:

$$A_{oj} = 2\pi M_n (1 - \nu_n^2) K_{ICn}^2 S_{qn} / E_n,$$

где M_n – число частиц на микрослое, K_{ICn} – трещиностойкость материала, S_{qn} – площадь поверхности частицы, E_n – модуль Юнга, ν_n – коэффициент Пуассона n -й компоненты. Предельное значение коэффициента интенсивности напряжений оценивается как $K_{IC} = \sigma_b (\pi \xi)^{1/2}$, где σ_b – прочность на разрыв, ξ – критическая длина трещины.

Учитывается возможность разрушения частиц приповерхностного слоя порошкового тела при выходе ударной волны на тыльную поверхность образца. Работа, которую необходимо совершить для разрушения частиц порошковой смеси: $A_p = \sigma_t \varepsilon + 3\gamma/2d$, $\gamma = \pi \sigma_b^2 \xi / 2E$, где σ_t – предел текучести вещества, γ – удельная энергия образования новой поверхности, ε – предельная пластическая деформация материала, d – средний размер частиц разрушенного вещества, σ_b – предел прочности на разрыв, E – модуль Юнга, ξ – размер дефекта. Следствием всех этих процессов является повышение реакционной способности компонентов.

Яркостная и радиационная температуры поверхности образца реагирующей порошковой смеси определяется тепловой и люминесцентной составляющими: $T_b = T_{bt} + L$, где T_{bt} – температура теплового излучения поверхности образца, L – люминесцентная составляющая излучения поверхности.

Тепловое излучение определяется термодинамической температурой поверхности образца. Люминесцентное – физико-химическими процессами, происходящими в приповерхностном слое образца.

Температура теплового излучения поверхности рассчитывается с использованием выражений, полученных по законам теплового излучения твердых тел. Яркостная температура монохроматического теплового излучения поверхности образца рассчитывается с использованием известной зависимости, которая выведена из законов Кирхгофа и Вина для монолитного материала:

$$1/T_{bt} - 1/T = -\lambda \ln \varepsilon_\lambda / c_2.$$

Радиационная температура теплового излучения поверхности рассчитывается по зависимости, выведенной из закона Стефана-Больцмана для монолитного материала: $T_{bt} = \varepsilon_i^{1/4} T$, где ε_i – суммарная излучательная способность.

Для рассматриваемого в работе композитного смесового материала эти соотношения усреднены по закону смесей. Термодинамическая температура поверхности в j -й момент времени определяется температурами микрослоев реакционной ячейки, составляющих приповерхностный слой образца: $T_j = T_{ij} p_i$, $p_i = n_i / N$, где T_{ij} – температура i -ой подобласти тыльной поверхности модельного тела в j -й момент времени, N – число подобластей тыльной поверхности модельного тела, n_i – количество подобластей тыльной поверхности модельного тела с заданной концентрацией C_i пластичного компонента. Излучательная способность поверхности определяется значениями излучательной способности подобластей приповерхностного слоя, зависящей от концентраций компонен-

тов порошковой смеси. Для монохроматической излучательной способности поверхности ε_λ : $\varepsilon_{\lambda j} = \varepsilon_{\lambda ij} p_i$ где $\varepsilon_{\lambda ij} = \varepsilon_{\lambda ijk}(T_{ij}) C_{ijk}$ – излучательная способность i -й подобласти поверхности образца в j -й момент времени, $\varepsilon_{\lambda ijk}$ – излучательная способность k -го компонента порошковой смеси в i -й подобласти поверхности, значения которой для монолитных образцов брались из справочной литературы, C_{ijk} – концентрация компонентов порошковой смеси. Суммарная излучательная способность поверхности ε_t рассчитывалась аналогичным образом.

Процессы пластической деформации и разрушения частиц после выхода ударного импульса на тыльную поверхность вызывают вспышки механолюминесценции, а процессы горения частиц порошковой смеси – вспышки хемиллюминесценции. Интенсивность механолюминесценции оценивается по форме импульса мощности работы разрушения $\partial A_p / \partial t_p$, где t_p – время разрушения. Для оценки частоты и интенсивности вспышек хемиллюминесценции используется оценка скорости прироста энтальпии компонентов порошковой смеси, определяющая подобный режим хемиллюминесценции: $I_{hl} = \rho c_p \Delta T C_i$, где ρ – плотность материала, c_p – теплоемкость, ΔT – прирост температуры, C_i – концентрация одного из компонентов порошковой смеси.

Приводится алгоритм решения поставленной задачи.

Для исследования поведения реагирующих порошковых тел при ударном нагружении решаются сопряженные задачи теплового баланса, ударной модификации порошкового тела, фильтрации жидкой фазы легкоплавкого компонента и макрокинетики химических превращений. Моделирование процессов изменения параметров состояния и реакционной способности реагирующих компонентов локальных зон порошковой смеси в процессе ударного нагружения проводится с использованием энергетического подхода. В каждый момент времени действия ударного импульса параметры состояния порошковой смеси уточняются итерационно. Предполагается, что запасенная энергия первоначально расходуется на совершение работы пластического деформирования частиц гетерогенной среды в окружающие их поры, а в дальнейшем расходуется на реализацию струйных течений, вызывающих разрушение поверхностных слоев частиц порошкового тела во время действия ударного импульса, оставшаяся энергия расходуется на совершение работы разрушения частиц за фронтом ударного импульса. В локальных микрообъемах реакционной ячейки процесс пластического затекания пор оценивается для гетерогенной среды покомпонентно на каждом шаге по времени с использованием модифицированной модели пористой среды В.Ф. Нестеренко. При этом считается, что действие ударного импульса в локальных микрослоях в каждый момент времени приходится на порошковую среду с текущими значениями пористости, температуры, концентраций компонентов, степени химических превращений и других параметров состояния. Полагается, что работа пластического течения переходит в тепло, определяя источники в уравнении теплового баланса. Оцениваются параметры механолюминесцентного излучения в каждой подобласти поверхности модельного образца.

Из решения задачи теплового баланса в каждом сечении модельного образца в каждый момент времени оценивается возможность фазовых переходов

компонентов и преодоление порога инициирования химических превращений. Оцениваются параметры хемилюминесцентного излучения каждой подобласти поверхности модельного образца

Уравнение теплового баланса представляется двухтемпературными уравнениями для температур каркаса и жидкой фазы, в которых учитывается объемный теплообмен между ними. При наличии открытой пористости и градиента порового давления в уравнении теплового баланса для жидкой фазы используется конвективный член, связанный с фильтрацией расплава.

Скорость движения жидкости определяется из закона фильтрации расплава для двух смежных микрослоев модельной реакционной ячейки, в виде закона Дарси с коэффициентом проницаемости, полученным для набора сферических частиц. Градиент порового давления определяется переменными термокапиллярными силами и давлением расплава, возникающим при действии ударного импульса и определяемым с учетом несущей способности каркаса.

Повышение реакционной способности порошковой системы в процессе ударного нагружения учитывается заданием макрокинетических параметров (предэкспоненциального множителя, энергии активации химических превращений) как функций от размера реакционной ячейки и работ, затраченных на пластическое деформирование порошковых частиц и разрушение их поверхностных слоев во время действия импульса нагрузки, а также на разрушение частиц смеси за фронтом ударного импульса.

Определяются эффективные значения излучательной способности порошковой смеси в каждой подобласти модельного образца.

Оценивается яркостная температура теплового излучения поверхности и параметры люминесцентного излучения поверхности порошкового компакта.

Третья глава посвящена анализу результатов компьютерного моделирования механохимических процессов, вызывающих излучение тыльной поверхности образцов динамически нагруженной железоалюминиевой термитной порошковой смеси и боковой поверхности образца порошковой смеси Ni-Al при СВС.

Достоверность результатов методики, реализующей алгоритм решения нестационарных задач теплопереноса, проверена рассмотрением нестационарной задачи теплопроводности, имеющей аналитическое решение. Для определения достоверности результатов компьютерного моделирования механохимических процессов, проведен вычислительный эксперимент по моделированию механохимических процессов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. Для оценки достоверности результатов компьютерного моделирования, полученных по предложенной методике, проведен вычислительный эксперимент по определению сходимости численных решений для различных значений шагов по времени и по пространству. Достоверность методики прогноза яркостной температуры теплового и люминесцентного излучения поверхности образцов подтверждается в процессе моделирования механохимических процессов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза интерметаллического соединения NiAl, хорошо изученного экспериментально.

На рисунке 2, а) представлены результаты прогноза развития во времени параметров теплового и хемилюминесцентного излучения боковой поверхности

для системы Ni-Al. Наблюдается наличие вспышек хемилюминесцентного излучения, которые накладываются на яркостную температуру теплового излучения боковой поверхности.

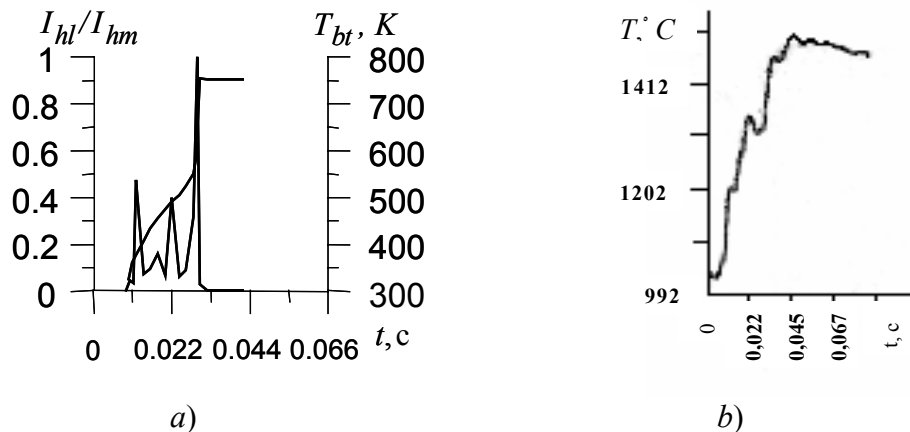


Рис. 2. Результаты прогноза изменения яркостной температуры теплового излучения, распределение относительной интенсивности вспышек хемилюминесцентного излучения боковой поверхности образца порошковой смеси типа Ni-Al (a), распределение яркостной температуры боковой поверхности образца, полученные экспериментально (b) (из работы Гарколь Д. А., Гуляев П. Ю., Евстигнеев В. В., Мухачев А. Б. Новая методика высокоскоростной яркостной пирометрии для исследования процессов СВС// ФГВ. –1994.–№1.– С.72-77).

Определяющим фактором структуры вспышек хемилюминесцентного излучения, представленных на рисунке 2, а), является наличие макроскопической структуры концентрационной неоднородности реагирующего материала. Физическая картина процесса излучения представляется следующим. Источники тепла, определяемые экзотермическими химическими превращениями в реагирующем порошковом компакте, характеризуют интенсивность хемилюминесцентного излучения. Результаты прогноза развития во времени теплового эффекта химических превращений в приповерхностном слое модельного образца в пределах длины реакционной ячейки приведены на рисунке 3.

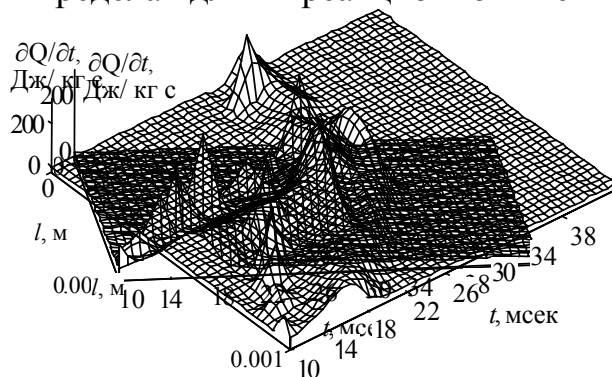


Рис. 3. Распределение источников тепла химической природы боковой поверхности образца порошковой смеси типа Ni-Al.

По длине реакционной ячейки можно выделить две характерных области. Им отвечают зоны реакционной ячейки с низким и высоким содержанием легкоплавкого компонента. Для запуска химической реакции в этих зонах необходимы затраты существенно разных количеств тепловой энергии на реализацию фазовых переходов и прогрева реагирующих компонентов до температуры запуска химических превращений. Скорость прогрева определяется различными эффективными значениями теплофизических параметров, поэтому запуск хи-

мических превращений наблюдается в разное время в различных подобластях боковой поверхности. После запуска химических превращений их протекание тормозится продуктом реакции, который является диффузионным барьером. Соответственно со спадом интенсивности химических превращений можно прогнозировать падение интенсивности хемилюминесценции. Вторичный пик интенсивности химических превращений, а значит и хемилюминесценции, определяется расплавом легкоплавкого компонента и резкой сменой режима превращений. Таким образом, наличие двух характерных областей реакционной ячейки определяет присутствие четырех основных пиков хемилюминесценции.

Полученные результаты вычислительного эксперимента для модельной смеси, характеризующейся распределением концентраций алюминия и никеля (линии 1, 2) и пористости (линия 3), приведенными на рисунке 1, *c*), хорошо согласуются с лабораторными экспериментами, полученными В. М. Вольпе, Д. А. Гарколь и др. (сравни рис.2, *a*) и рис.2, *b*)).

Проведен вычислительный эксперимент по оценке изменения во времени параметров теплового и люминесцентного излучений тыльной поверхности образца динамически нагруженной реагирующей порошковой смеси, а также анализ зависимостей параметров излучения неочищенной поверхности образца от структурных характеристик исходного компакта, концентрационных параметров структуры приповерхностного слоя образца и интенсивности механического воздействия.

Исследуется излучение тыльной поверхности модельного образца железоалюминиевой термитной порошковой смеси, характеризующейся параметрами распределения концентрации алюминия по поверхности $a_1=0,37$, $\sigma^2=25,43$, с размером частиц 10 мкм, средней пористостью 30%, степенью концентрационной неоднородности $b/a=1,2$. Рассматривается динамическое уплотнение порошкового компакта импульсом давления с амплитудой 5 ГПа, 10 ГПа, 15 ГПа и длительностью 0,1 мкс.

На рисунке 4 представлены результаты прогноза параметров излучения тыльной поверхности образцов железоалюминиевой термитной порошковой смеси, характеризующейся степенью концентрационной неоднородности $b/a=1,2$ за время излучения после выхода ударного импульса различной амплитуды. Где $I_{hm}=54,89656$ кДж/м³с – максимальная интенсивность хемилюминесцентного излучения тыльной поверхности эталонного образца. В качестве эталона рассматривался образец железоалюминиевой термитной порошковой смеси с размером частиц 10 мкм, средней пористостью $P_0=30\%$, характеристиками распределения концентрации алюминия по поверхности $a_1=0,37$, $\sigma^2=25,43$, нагруженный ударным импульсом амплитудой $P_f=25$ ГПа.

На рисунке 5 приведены зависимости параметров излучения тыльной поверхности модельных образцов термитной смеси с параметром $b/a=1,2$ от амплитуды ударного импульса.

С ростом амплитуды динамического воздействия наблюдается уменьшение времени появления вспышек хемилюминесценции (рис. 5, *a*, линия 1), времени возникновения максимальной вспышки хемилюминесцентного излучения (рис. 5, *a*, линия 3), продолжительности хемилюминесценции тыльной поверхности (см. рис. 5, *a*, линия 2).

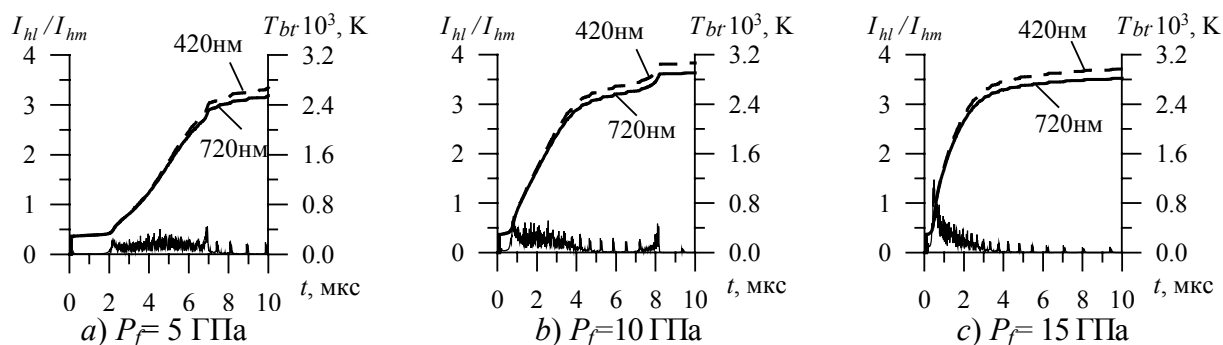
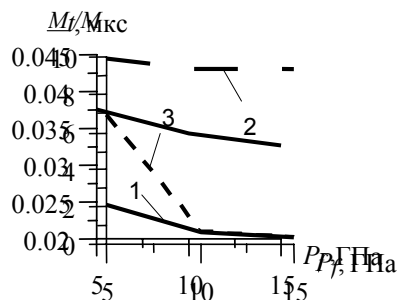
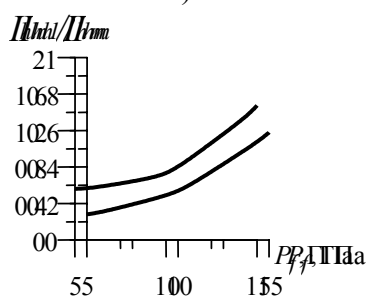


Рис. 4. Результаты прогноза изменения яркостных температур теплового излучения, распределение относительной интенсивности вспышек хемилумinesцентного излучения поверхности образца термитной смеси.



a)

b)



c)

d)

Рис. 5. Зависимости характерных времен излучения поверхности а) (линия 1—время начала вспышек хемилумinesцентного излучения, линия 2— время окончания вспышек хемилумinesцентного излучения, линия 3 – время появления максимальной вспышки хемилумinesцентного излучения), относительного числа вспышек хемилумinesцентного излучения б), относительной интенсивности максимальной вспышки с), первой вспышки хемилумinesцентного излучения д) тыльной поверхности образца порошковой смеси от амплитуды ударного импульса.

Поскольку относительное число вспышек хемилумinesцентного излучения тыльной поверхности рассматривается за фиксированный промежуток времени 10 мкс, то изменение параметра \underline{M}/M может характеризовать изменение

частоты вспышек хемилюминесценции. Частота вспышек хемилюминесценции поверхности с ростом амплитуды ударного импульса уменьшается (рис. 5, *b*).

Прогнозируется повышение интенсивности первой вспышки хемилюминесценции поверхности (рис. 5, *d*) и интенсивности максимальной вспышки хемилюминесценции с ростом амплитуды ударного импульса (рис. 5, *c*). Для значений амплитуды ударного импульса до 10 ГПа изменение интенсивности максимальной и первой вспышек хемилюминесценции незначительно. Поэтому для рассмотренной модельной порошковой смеси при использовании результатов пирометрических измерений амплитуду динамического воздействия на реагирующие порошковые материалы в диапазоне значений до 10 ГПа можно оценить по зависимостям времени появления максимальной вспышки и частоты вспышек хемилюминесценции тыльной поверхности.

Объяснение наблюдаемого характера изменения параметров излучения может быть сделано из анализа зависимостей параметров макрокинетики химических превращений динамически нагруженного реагирующего порошкового материала, приведенных на рисунке 6.

Повышение интенсивности первой вспышки хемилюминесценции поверхности (рис. 5, *d*) отражает увеличение стартовой интенсивности химических превращений от амплитуды ударного воздействия, о чем свидетельствует распределение массовой доли прореагировавших компонентов (рис. 6, *b*). Рост стартовой интенсивности химических превращений с ростом амплитуды динамического воздействия, определяется увеличением степени механической активации подобластей тыльной поверхности, о чем свидетельствует понижение относительной энергии активации, представленной на рисунке 6, *c*).

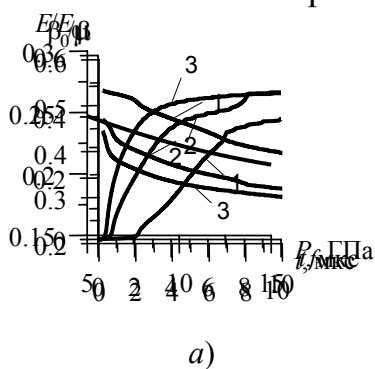


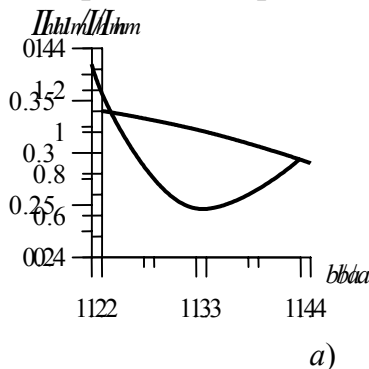
Рис. 6. Распределения относительного параметра химической активности *a*) приповерхностного слоя порошковой смеси, массовая доля прореагировавших компонентов *b*), зависимость относительной энергии активации *c*) приповерхностного слоя образца от амплитуды ударного импульса (линия 1–5ГПа, линия 2– 10ГПа, линия 3 – 15ГПа) (Начальная энергия активации железоалюминиевой термитной порошковой смеси $E_0=171544$ Дж/моль.).

Наблюдаемое увеличение продолжительности хемилюминесценции с ростом амплитуды ударного воздействия (рис. 5, *a*), сокращение времени появления максимальной вспышки (рис. 5, *a*, линия 3) и частоты вспышек (рис. 5, *b*), повышение интенсивности максимальной вспышки хемилюминесценции с ростом амплитуды ударного импульса также определяется ростом степени механической активации и, как следствие, повышением скорости реагирования порошковой смеси на поверхности и увеличением ее химической активности, о чем свидетельствует понижение относительного параметра химической активности (см. рис. 6, *a*).

Повышение степени концентрационной неоднородности порошкового компакта определяет увеличение разброса концентрации компонентов порошковой смеси относительно среднего значения.

Рассмотрена модельная порошковая смесь $\text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{Fe}_3\text{O}_4 - \text{Al}$ с размером частиц 10 мкм и начальной средней пористостью 30%. Исследовалось излучение тыльной поверхности модельных образцов с параметрами распределения концентрации алюминия по тыльной поверхности: математическим ожиданием $a_1 = 0,37$, дисперсией $\sigma^2 = 19,06$ для параметра концентрационной неоднородности $b/a = 1,2$, $\sigma^2 = 25,43$ для параметра концентрационной неоднородности $b/a = 1,3$, $\sigma^2 = 35,38$ для параметра концентрационной неоднородности $b/a = 1,4$.

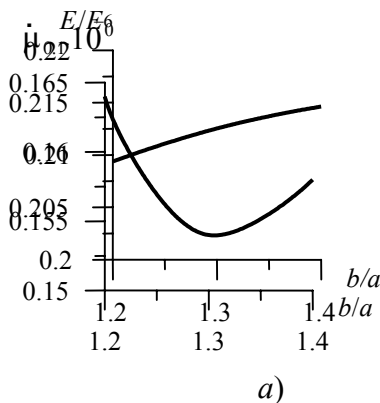
На рисунке 7 представлены зависимости параметров излучения тыльной поверхности образца от степени концентрационной неоднородности.



b)

Рис. 7. Зависимости относительной интенсивности максимальной вспышки хемилюминесценции а) и первой вспышки хемилюминесцентного излучения б) от степени концентрационной неоднородности порошкового компакта.

Наблюдаемое понижение интенсивности максимальной вспышки хемилюминесценции с ростом степени концентрационной неоднородности определяется уменьшением степени механоактивации порошковой смеси на поверхности, о чем свидетельствует уменьшение относительной энергии активации (см. рис. 8, а). Изменение интенсивности первой вспышки хемилюминесцентного излучения отражает изменение стартовой интенсивности химических превращений с ростом степени концентрационной неоднородности, о чем свидетельствует зависимость скорости выхода 10% массовой доли прореагировавших компонентов (см. рис.8, б).

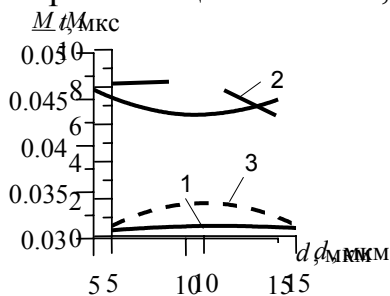


b)

Рис. 8. Зависимости относительной энергии активации а) порошковой смеси приповерхностного слоя образца, скорости выхода 10% массовой доли прореагировавших компонентов б) от параметра концентрационной неоднородности (линия 1- $b/a = 1,2$, линия 2- $b/a = 1,3$, линия 3- $b/a = 1,4$).

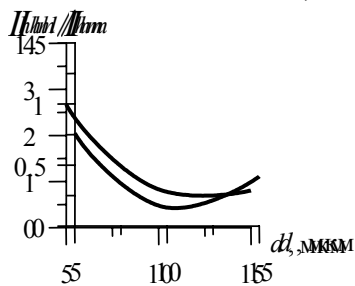
В результате проведенных исследований выявлено, что по совокупности параметров излучения тыльной поверхности образца порошковой смеси (характерным временам излучения поверхности, относительному числу вспышек хемилюминесценции, относительной интенсивности первой вспышки хемилюминесцентного излучения, относительной максимальной интенсивности вспышек хемилюминесцентного излучения) можно оценить концентрационную структуру тыльной поверхности, исходный размер частиц порошковой смеси, степень концентрационной неоднородности порошкового компакта, амплитуду динамического воздействия. Выявлено, что характер изменения параметров люминесцентного излучения определяется неоднородностью механоактивации подобластей тыльной поверхности, интенсивность первой вспышки хемилюминесценции тыльной поверхности хорошо коррелирует со стартовой интенсивностью химических превращений приповерхностного слоя образца реагирующей смеси.

На рисунке 9 представлены зависимости от размера частиц порошкового компакта параметров люминесцентного излучения поверхностей образца. При увеличении размера частиц с 5 до 10 мкм и толщине излучающего слоя 5 мкм изменение концентрации алюминия на поверхности не происходит. Увеличение размера частиц с 10 до 15 мкм приводит к увеличению концентрации алюминия на поверхности в 1,24 раза. Поэтому распределение концентрации алюминия по тыльной поверхности задается параметрами: дисперсией $\sigma^2 = 25,43$, математическим ожиданием концентрации алюминия на поверхности $a_1 = 0,33$, для размера частиц 5 и 10 мкм, и $\sigma^2 = 25,43$, $a_1 = 0,41$ для размера частиц 15 мкм.



a)

b)



c)

d)

Рис. 9. Зависимости характерных времен излучения поверхности а) (линия 1—время начала вспышек хемилюминесцентного излучения, линия 2— время окончания вспышек хемилюминесцентного излучения, линия 3 — время появления максимальной вспышки хемилюминесцентного излучения), относительного числа вспышек хемилюминесцентного излучения б), относительной интенсивности максимальной вспышки хемилюминесценции с) и первой вспышки хемилюминесцентного излучения д) от размера частиц порошкового компакта.

Из представленных результатов наблюдается немонотонное изменение времени появления максимальной вспышки хемилюминесцентного излучения (рис.9, линия 3), частоты появления вспышек хемилюминесценции, интенсивно-

стей максимальной и первой вспышки излучения. При увеличении размера частиц с 5 мкм до 10 мкм относительное число вспышек изменяется незначительно, время появления максимальной вспышки увеличивается (рис.9, линия 3), интенсивности максимальной и первой вспышек уменьшаются, это может быть объяснено увеличением времени термической активации слоя тыльной поверхности образца. При дальнейшем увеличении размера частиц относительное число вспышек увеличивается, время появления максимальной вспышки уменьшается, интенсивность максимальной и первой вспышек увеличиваются, что объясняется повышением степени механоактивации порошковой смеси приповерхностного слоя в связи с увеличением концентрации алюминия на поверхности.

Структура приповерхностного слоя тыльной поверхности образца реагирующей смеси будет сопоставима со структурой порошкового тела внутри образца при удалении приповерхностного слоя, структура которого модифицируется в процессе компактирования порошковой смеси при взаимодействии с пуансоном пресс-формы. Проведен анализ зависимостей параметров люминесцентного излучения очищенной поверхности образца (с изначально удаленным приповерхностным слоем) от структурных параметров исходного компакта, концентрационных параметров структуры приповерхностного слоя образца и интенсивности механического воздействия.

На рисунке 10 представлены зависимости параметров люминесцентного излучения тыльной поверхности образца от размера частиц порошкового компакта для очищенной поверхности образца.

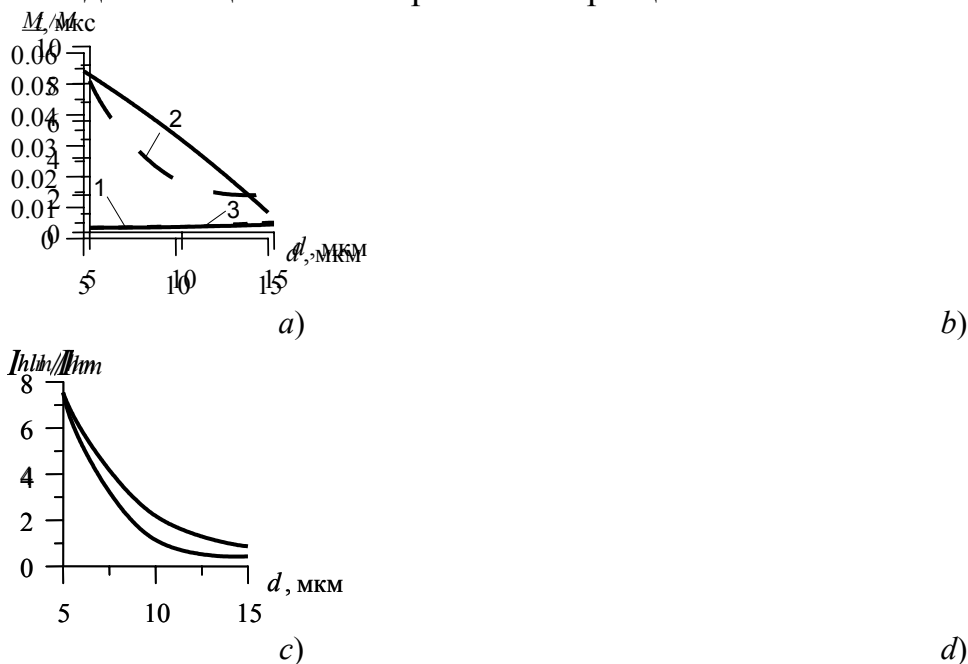


Рис. 10. Зависимости характерных времен излучения очищенной поверхности *a)*, относительного числа вспышек хемилюминесцентного излучения *b)*, относительной интенсивности максимальной вспышки хемилюминесценции *c)* и первой вспышки хемилюминесцентного излучения *d)* от размера частиц порошкового компакта.

Сравнения зависимостей параметров излучения очищенной поверхности и неочищенной поверхности показали, что характер излучения неочищенной поверхности порошкового компакта зависит от содержания пластичного компонента в тонком излучающем приповерхностном слое. Таким образом, для оцен-

ки характера изменения физико-химических процессов в объеме порошкового тела по результатам пирометрических измерений излучения тыльной поверхности можно рекомендовать предварительно удалить приповерхностный слой порошкового компакта.

В заключении диссертации приводятся основные результаты и выводы.

В приложении приведены таблицы свойств материалов и макро – блок схема компьютерного моделирования.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана модель реагирующей порошковой среды, позволяющая прогнозировать поведение деформируемых твердых порошковых тел, способных к фазовым, структурным и безгазовым экзотермическим химическим превращениям, определяющим излучение их поверхностей в условиях динамического нагружения.
2. Разработана методика компьютерного моделирования механохимических процессов, позволяющая прогнозировать параметры состояния деформируемых твердых химически реагирующих порошковых тел и характеристики теплового и люминесцентного излучения поверхности порошковых компактов, подвергнутых механическому воздействию. Методика применима для моделирования механохимических процессов в реагирующих порошковых смесях под действием ударных импульсов с амплитудой до 30 ГПа, размером частиц исходной смеси от 0,6 мкм до 100 мкм для очищенной поверхности образца и с размером частиц исходной смеси от 0,6 мкм до 20 мкм для неочищенной поверхности образца.
3. Показано, что характер излучения тыльной поверхности образца предварительно скомпактированной реагирующей порошковой смеси определяется процессами теплового излучения, механо- и хемилюминесценцией на различных структурных уровнях и отражает закономерности деформирования реагирующего твердого порошкового тела.
4. Показано, что по характеристикам люминесцентного излучения можно судить о степени концентрационной неоднородности и размере частиц реагирующей порошковой смеси, сформированных как в процессе предварительного прессования порошковой шихты, так и в результате динамического нагружения. Показано, что форма, длительность и частота вспышек люминесцентного излучения определяются, наряду с условиями нагружения, степенью неоднородности порошковой смеси, величиной исходной пористости и размерами частиц порошковых компонентов.
5. При интерпретации данных экспериментальных исследований поведения реагирующих порошковых материалов при динамическом нагружении методами оптической пирометрии, форма, длительность и частота вспышек люминесцентного излучения могут служить источником информации о модификации структуры порошкового тела, кинетике механохимических процессов, степени механоактивации порошковой смеси и т. п.
6. Для изучения физико-химических процессов в реагирующих твердых деформируемых порошковых телах методами оптической пирометрии рекомендуется производить экспериментальные исследования на образцах с предварительно удаленным приповерхностным слоем.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Влияние параметров структуры поверхности образца реагирующей порошковой среды на ее излучение в процессе механохимических превращений // Вычисл. технологии, т. 9, №3(42), часть 3, 2004.- С.81-86.
2. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Оценка эволюции параметров состояния порошковых систем методами яркостной пирометрии// Вестник Томского государственного университета. Общенаучный периодический журнал. Бюллетень оперативной научной информации. – Томск: ТГУ, №13, 2003. – С. 16-22.
3. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Оценка эволюции параметров состояния ударно нагруженных порошковых систем методами яркостной пирометрии// Физическая мезомеханика, Т. 7, №3, 2004, С. 95-100.
4. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Исследование влияния условий нагружения на свечение поверхности образца динамически нагруженной реагирующей порошковой смеси// Физическая мезомеханика, Т. 7, Спец. Выпуск, Ч. 2, 2004, С. 78-81.
5. Leitsin V.N., Dmitrieva M.A., Kolmakova T. V. Multilevel computer simulation of shock synthesis of carbides// The seventh International Scientific and Practical Conference of Students, Post-graduates and Young Scientists “Modern Techniques and Technology” (МТТ’ 2001), Tomsk, Tomsk Polytechnic University. ISBN: 0-7803-6346-9. С. 73-75.
6. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Теоретические оценки экспериментального метода яркостной пирометрии с привлечением модели реагирующих порошковых сред// Тезисы докладов IV Всероссийской конференции молодых ученых «Физическая мезомеханика материалов» Томск 26-30 ноября, 2001 г. С. 98.
7. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Моделирование физико-химических процессов в ударно нагруженной термитной порошковой смеси, сопровождающихся свечением//«Наука. Техника. Инновации» // Региональная научная конференция студентов, аспирантов, молодых ученых: Тез. докл. в 5-ти частях. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2001. Часть 3., С. 140-141.
8. Кобраль И. В., Дмитриева М.А., Колмакова Т. В. Многоуровневый подход к моделированию механохимических процессов синтеза материалов методами порошковой металлургии// XXVII Гагаринские чтения. Тезисы докладов Международной молодежной научной конференции. Москва, 2-7 апреля 2001 г. М.: Изд-во «МАТИ» - Российского государственного технологического университета им К.Э. Циолковского, 2001. том 2, – С. 126-127.
9. Лейцин В.Н., Кобраль И. В., Колмакова Т. В. Компьютерное моделирование условий ударного синтеза карбидов и боридов// Современные проблемы физики и технологии. Сборник статей молодых ученых. – Томск: Изд-во Томского ун-та. 2001. – С. 38-41.
10. Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Моделирование механохимического поведения ударно нагруженной термитной смеси// Материалы XL Международной научной студенческой конференции «Студент и научно-технический прогресс»: Физика/ Новосибирский гос. ун-т. Новосибирск, 2002. С. 97-98.

11. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Методика моделирования эффектов люминесценции поверхности железоалюминиевого порошкового компакта// Современные проблемы физики и технологии. Сборник статей молодых ученых. – Томск: Изд-во Томского ун-та. 2002. С. 19-22.
12. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Методика моделирования физико-химических процессов в реагирующей железоалюминиевой термитной порошковой смеси с целью прогнозирования изменения температур компонентов порошковой смеси во времени// Материалы VII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "IV Сибирская школа молодого ученого", ТГПУ, С. 274-277.
13. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Моделирование процессов ударной активации железоалюминиевой термитной смеси с учетом фрагментации частиц// Механика летательных аппаратов и современные материалы: Сборник избранных докладов VIII Всероссийской научно-технической конференции / Под ред. Э. Р. Шрагера. – Томск: Изд-во Том. ун -та, 2003, Вып. 4. С. 68-69.
14. Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Моделирование процессов, вызывающих свечение поверхности образца ударно нагруженной термитной смеси// Науч. сессия МИФИ-2003: Сб. науч. тр.: В 14 т. М.: МИФИ, 2003. Т.14. С. 171-172.
15. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Моделирование механохимических процессов в ударно нагруженной железоалюминиевой термитной смеси.// Материалы докладов региональной научной конференции студентов, аспирантов, молодых ученых "Наука. Техника. Инновации", Новосибирск 2002 г. Ч. I С. 127-128.
16. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Влияние структурных параметров ударно нагруженной железоалюминиевой термитной смеси на свечение тыльной поверхности// Современные проблемы физики и технологии Школа – семинар молодых ученых, СФТИ, 2003, СФТИ, 2003., сб. статей молодых ученых, Томск, С. 32-34.
17. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Моделирование механохимических процессов тыльной поверхности образца термитной смеси// IX Международная научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные техника и технологии», 7-11 апреля, г. Томск, Труды в 2-х т. – Томск: Изд-во Томского политехн. Ун-та, 2003. Т.2. – С. 92-94.
18. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Исследование зависимости излучения тыльной поверхности ударно нагруженного образца термитной смеси от ее структуры// ВНКСФ-9, Красноярск, 2003, Сборник тезисов, т.2, с. 661-662.
19. Дмитриева М.А, Колмакова Т. В. Учет возможности формирования наноструктур при ударном нагружении ультрадисперсных реагирующих порошковых смесей// XXIV Гагаринские чтения. Тезисы докладов Международной молодежной научной конференции. Москва, 2003 г.– С. 20.
20. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Учет формирования наноструктур при ударном нагружении ультрадисперсных реагирующих порошковых смесей// Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник избранных докладов научно-технической конференции/ Под ред. Э. Р. Шрагера– Томск: Изд-во Том. ун -та, 2003.– С. 81-82.

21. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Свечение тыльной поверхности наноструктурного образца термитной смеси при ударном нагружении // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник избранных докладов научно-технической конференции/ Под ред. Э. Р. Шрагера– Томск: Изд-во Том. ун -та, 2003.- С. 83-84.
22. Leitsin V.N., Kolmakova T. V., Dmitrieva M.A. Estimation of state parameters evolution of shock- loaded powder systems by the brightness pyrometry methods// Book of Abstracts of the International Workshop "Mesomechanics: Fundamentals and Applications"(MESO' 2003) and the VII International Conference "Computer Aided Design of Advanced Materials and Technologies" (CADAMT' 2003), 2003, Tomsk, Russia, P. 236-237.
23. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Интерпретация экспериментальных результатов исследования излучения реагирующих порошковых тел// Материалы второй Всероссийской конференции молодых ученых «Материаловедение, технологии и экология в третьем тысячелетии».- Томск: ИФПМ СО РАН, 2003.– С. 307-309.
24. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Компьютерное моделирование механохимических процессов в ударно нагруженной термитной смеси// Сборник докладов Международной научной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы механики».- Хабаровск: Изд-во Хабар. Гос. техн. Ун-та, 2003.–Т.2.– С. 212-219.
25. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Методика интерпретации экспериментальных данных, полученных при горении порошковых смесей методами яркостной пирометрии// Материалы докладов всероссийской научной конференции молодых ученых "Наука. Технологии. Инновации" в 6 частях. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2003. Часть 1.– С. 121-123.
26. Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Моделирование физико-химических процессов в реагирующих порошковых материалах// Науч. сессия МИФИ-2004: Сб. науч. тр.: В 15 т. М.: МИФИ, 2004. Т.15. -С. 100-101.
27. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Определяющие факторы излучения поверхности динамически нагруженных реагирующих порошковых компактов// Современные проблемы физики, технологии и инновационного развития: Сб. статей молодых ученых.– Томск: Изд-во Том. ун-та, 2004.– С. 34-35.
28. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Исследование структуры ударно-нагруженных реагирующих порошковых тел методами яркостной пирометрии // Сборник трудов конференции «Физика и химия высокоэнергетических систем», Томск, ТГУ, 2004.–С. 32-33.
29. Kolmakova T. V., Kobral I. V. Simulation of conditions of realization of synthesis processes in shock-loaded powder systems Ti-C type// Book of Abstracts II Conference of Asian Consortium for Computational Materials science «ACCMS-2»/ Novosibirsk: Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, 2004. P. 112.
30. Лейцин В.Н., Колмакова Т. В., Дмитриева М.А. Влияние структурных параметров и условий нагружения на характер излучения поверхности реагирующей порошковой смеси// Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики: Доклады конференции. – Томск: Изд.-во Том. ун-та, 2004.– С.206-207.

31. Лейцин В.Н., Дмитриева М.А., Колмакова Т. В., Кобраль И. В. Моделирование физико-химических процессов, сопровождающих ударный синтез в порошковых смесях// XIII Симпозиум по горению и взрыву: тезисы докладов. - Черноголовка. 2005 г. – С. 53.