На правах рукописи

Евстигнеев Николай Константинович

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЖИМОВ ТВЕРДОФАЗНОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В УСЛОВИЯХ КВАЗИСТАТИЧЕСКОГО НАГРУЖЕНИЯ

01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Томск – 2010

Работа выполнена на кафедре математической физики ГОУ ВПО «Томский государственный университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор Князева Анна Георгиевна

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор Киселев Сергей Петрович

доктор физико-математических наук, профессор Скрипняк Владимир Альбертович

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН (г. Новосибирск).

Защита состоится 12 ноября 2010 г. в 14.30 часов на заседании диссертационного совета Д 212.267.13 при ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 34а.

Автореферат разослан «__» октября 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
доктор технических наук Ю.Ф. Христенко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Одним из традиционных направлений механики деформируемого твердого тела является исследование влияния механического нагружения на фазовые превращения и химические реакции в твердой фазе. Это связано как с теоретической проблемой изучения взаимодействия полей различной физической природы, с построением моделей многокомпонентных и многофазных сред, так и с проблемой управления физико-химическими процессами в современных технологиях.

Механические воздействия могут быть как статическими (растяжение, сдвиг, кручение, поворот), так и динамическими (ударные волны, взрыв, вибрация, прессование, ультразвук). В любом случае влияние внешней нагрузки связано с изменением режимов превращения (скорость, направление, стадийность). В полной мере это относится к процессам самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) и спекания. Известны ряд ученых, работы которых связаны с моделированием превращений в твердых средах (М.А. Гринфельд, А.Б. Фрейдин, А.М. Столин, В.К. Смоляков). Начало построения моделей многокомпонентных сред связывают с именами А.К. Эрингена, Р.М. Боуэна, В. Новацкого.

Однако связанные модели физико-химических превращений в различных условиях нагружения – большая редкость, что предопределяет актуальность работы. Настоящая работа связана с исследованием влияния напряженно-деформированного состояния (НДС) на режимы распространения твердофазной экзотермической химической реакции с учетом связанности полей деформаций, температуры и концентраций.

Несмотря на растущее количество экспериментальных работ в этой области, реологическое поведение материалов в условиях изменения температуры изучено пока недостаточно. Это относится и к порошковым материалам, из которых синтезируют тугоплавкие продукты в условиях квазистатического прессования или СВС-экструзии.

Реакции в безгазовых системах протекают с выделением большого количества тепла, что часто приводит к расплавлению реагентов и продуктов, так что сами реакции могут протекать и в жидкой фазе. Вследствие больших тем-

ператур во фронте реакции, изменения свойств в процессах плавления и кристаллизации и в ходе превращения такие реакции сопровождаются появлением внутренних напряжений, которые могут оказывать влияние на кинетику процесса, что представляет существенный интерес для изучения возможности управления такими процессами.

Цель работы состоит в теоретическом изучении влияния условий квазистатического нагружения и реологии на режимы твердофазного превращения.

В соответствии с поставленной целью требуется:

1) построить связанные модели распространения экзотермической химической реакции в твердой фазе при различных условиях квазистатического нагружения,

2) разработать алгоритмы численного исследования связанных моделей,

3) исследовать влияние связанности тепловых и механических процессов на режимы превращения и эволюцию полей напряжений и деформаций в условиях одноосного растяжения, сдвига и жесткой заделки торцов,

4) сформулировать и численно реализовать математическую модель процесса высокотемпературного синтеза, совмещенного с плунжерной экструзией смеси через коническую матрицу; определить технологические параметры, обеспечивающие наиболее благоприятные условия протекания процесса,

5) исследовать эволюцию НДС в процессе синтеза для различных реологических моделей.

Научная новизна работы. В диссертационной работе впервые

1) сформулированы и исследованы связанные модели твердофазных превращений в условиях одноосного растяжения, сдвига и жесткой заделки торцов; продемонстрировано качественно различное влияние вида нагружения на режимы превращения,

2) разработаны алгоритмы численного исследования связанных задач,

3) предложена связанная модель процесса плунжерной экструзии, совмещенной с высокотемпературным синтезом интерметаллического соединения.

На защиту выносятся:

– связанная математическая модель распространения химической реакции в твердой фазе для различных вариантов НДС,

– результаты численного моделирования влияния квазистатического механического нагружения на динамику химического превращения,

– комплекс результатов численного моделирования процесса высокотемпературного синтеза, совмещенного с плунжерной экструзией через коническую матрицу,

– результаты численного исследования влияния реологических свойств среды на эволюцию полей напряжений и деформаций в материале в процессе синтеза под нагрузкой,

– алгоритмы численного исследования предложенных связанных моделей.

Практическая ценность работы. Разработанные алгоритмы численного решения связанных моделей могут быть использованы для изучения НДС материалов в иных условиях нагружения, с иными реологическими свойствами, а также могут быть распространены на многокомпонентные среды с учетом стадийности превращения. Полученные результаты представляют интерес для изучения проблем синтеза новых материалов, способов управления реакциями в конденсированной фазе. Результаты расчетов, представленные в работе, могут быть использованы для выбора оптимальных технологических параметров при экспериментальном исследовании СВС-экструзии различных интерметаллидных систем.

Достоверность научных результатов обеспечивается корректной постановкой решаемых в диссертационной работе задач; использованием современных физических представлений и математических и вычислительных методов, тщательным тестированием программ; непротиворечивостью полученных результатов и их соответствием в предельных случаях теоретическим результатам, известным из литературы, а также имеющимся экспериментальным фактам.

Личный вклад автора заключается в анализе литературных данных, написании и отладке программ, численном исследовании сформулированных задач, обсуждении полученных результатов, формулировании основных научных положений и выводов. Все работы, опубликованные в соавторстве, выполнены при личном участии автора.

Апробация работы. Основные положения и результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих Всероссийских и Международных конференциях и семинарах: V Всероссийская конференция «Механика микронеоднородных материалов и разрушение» (Екатеринбург, 2008), XXXIV Международная молодежная научная конференция «Гагаринские чтения» (Москва, 2008), XVII Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2008), XXXIII Дальневосточная математическая школа-семинар им. академика Е.В. Золотова (Владивосток, 2008), XXXVII Международная летняя школа-конференция «Advanced Problems in Mechanics» (Санкт-Петербург, 2009), V Всероссийская конференция молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (Томск, 2009), Международная конференция по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов (Томск, 2009), II Международная школа-конференция молодых ученых «Физика и химия наноматериалов» (Томск, 2009), II Международная конференция «Проблемы нелинейной механики деформируемого твердого тела» (Казань, 2009), X Международная конференция «Забабахинские научные чтения» (Снежинск, 2010), VII Международная конференция «Simulation of multiphysics multiscale systems» (Амстердам, 2010), VII Международная конференция «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике» (Новосибирск, 2010).

Публикации. Основные результаты диссертации представлены в трудах вышеперечисленных конференций, а также в журналах «Известия высших учебных заведений. Физика», «Procedia computer science», «Известия Томского политехнического университета», «Физика горения и взрыва». Всего по материалам диссертации опубликовано 13 работ [1–13].

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, пяти разделов, заключения и списка использованной литературы из 176 наименований. Работа изложена на 131 странице, включая 102 рисунка и 1 таблицу.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, формулируется цель и задачи исследования, приводится научная новизна и практическая

значимость полученных результатов, а также сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первом разделе дается краткий аналитический обзор российских и зарубежных работ по теме исследования.

Представлены примеры моделей, иллюстрирующих роль перекрестных эффектов в системе «химическое превращение – механические напряжения». Перечислены основные виды технологий, использующих синтез в твердой фазе в сочетании с различными видами нагружения. Показана ограниченность как чисто тепловых моделей твердофазного синтеза, так и моделей механического поведения материалов с изменяющимися свойствами без явного учета физико-химических процессов.

Результаты обзора подтверждают актуальность темы работы, обоснованность цели, задач и методов исследований.

Во втором разделе приведены основные уравнения и определяющие соотношения, которые используются в работе.

На основе уравнений механики сплошных сред и уравнения Гиббса осуществляется вывод уравнения теплопроводности, в котором учитывается работа как упругих, так и вязких напряжений. Уравнение химической кинетики в соответствии с представлениями [1, 2] также записано с учетом работы напряжений.

В теории термоупругости традиционно используются соотношения Дюамеля-Неймана: $\sigma_{ij}^{e} = 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} + \delta_{ij}[\lambda\varepsilon_{kk} - 3K\alpha_T(T - T_0)]$, где σ_{ij}^{e} – тензор упругих напряжений, ε_{ij} – тензор деформаций, λ, μ – коэффициенты Ламэ, δ_{ij} – символ Кронекера, по повторяющемуся индексу подразумевается суммирование: $\varepsilon_{kk} = \sum_{i=1}^{3}\varepsilon_{ii}$, K – модуль изотермического всестороннего сжатия, α_T – коэффициент термического расширения, T – температура. Если состав среды в ходе процесса изменяется, как, например, происходит при химических превращениях, то для связи тензоров напряжений и деформаций следует применять обобщенные соотношения Дюамеля-Неймана:

$$\sigma_{ij}^{e} = 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} + \delta_{ij}[\lambda\varepsilon_{kk} - K\omega], \tag{1}$$

где $\omega = 3\left[\alpha_T (T - T_0) + (\alpha_p - \alpha_r) Y\right]$ – функция объемного расширения, $\alpha_p - \alpha_r$ – коэффициент, учитывающий изменение объема вследствие несоответствия объемов конечной и начальной фаз, Y – степень превращения. Несложно переписать соотношения (1) в виде

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{2\mu} + \delta_{ij}\left[-\frac{\lambda}{3K}\cdot\frac{\sigma_{kk}}{2\mu} + \alpha_T (T - T_0) + (\alpha_p - \alpha_r) Y\right] = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^T + \varepsilon_{ij}^Y,$$

где первое слагаемое в правой части – это обратимые деформации, вызванные упругими напряжениями, второе – термические деформации; третье – необратимые деформации, связанные с превращениями в веществе.

При математическом описании процессов упругого и вязкого взаимодействия хорошо известна аналогия в формулировке реологических соотношений. Действительно, для упругой и вязкой сред имеют место соотношения

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} + \delta_{ij}\lambda\varepsilon_{kk},$$

$$\sigma_{ij}^V = 2\mu_V \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij}\left(\zeta - \frac{2}{3}\mu_V\right)\dot{\varepsilon}_{kk},$$

где μ_V – коэффициент динамической вязкости, ζ – модуль объемной вязкости. Воспользуемся этой аналогией для выражения (1). Тогда для вязких напряжений можно записать

$$\sigma_{ij}^V = 2\mu_V \cdot \dot{\varepsilon}_{ij} + \delta_{ij}\left[\left(\zeta - \frac{2}{3}\mu_v\right)\dot{\varepsilon}_{kk} - \zeta\dot{\omega}\right], \qquad (2)$$

В общем случае считается, что полный тензор напряжений включает упругую (1) и вязкую (2) составляющие.

В третьем разделе сформулирована и исследована модель распространения твердофазного превращения в условиях одноосного нагружения. Рассматривается неподвижная пластина из реакционноспособного вещества под действием внешнего одноосного растяжения. Величина нагрузки составляет 0.01 от предела прочности на разрыв материала пластины. Направление действия нагрузки перпендикулярно направлению распространения химической реакции.

В модели считаем, что экзотермическая реакция может быть описана простой суммарной схемой $A \to B$ (реагент – продукт реакции); температура плавления не достигается, и вся реакция происходит в твердой фазе. Так как ско-

рость распространения твердофазной реакции много меньше скорости распространения механических возмущений, силами инерции пренебрегаем. Теплообмен с внешней средой не учитываем.

На основе этой задачи исследована эволюция полей напряжений и деформаций в зоне реакции с учетом тепловыделения и изменения объема в ходе реакции.

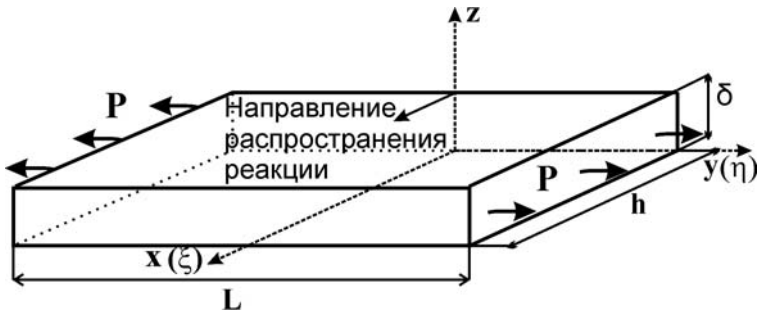


Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи.

Задача состоит из двух частей, которые с учетом принятых предположений частично решаются независимо. На первом этапе рассматриваем задачу о механическом равновесии пластины в приближении обобщенного плоского напряженного состояния. Используя уравнения равновесия и условие совместности деформаций, определяем все ненулевые компоненты тензоров напряжений и деформаций: σ_{xx}, σ_{yy}, ε_{xx}, ε_{yy}, ε_{zz}. С учетом полученного решения приходим к нелинейной задаче о распространении реакции в твердой фазе, которая решается численно в безразмерных переменных. Связанность процессов характеризуют параметры:

$$\delta = \frac{(3K\alpha_T)^2 (T_* - T_o)}{c\rho(\lambda + 2\mu)}, \; A = \frac{k_\sigma Q}{E},$$

где c – теплоемкость, ρ – плотность, $T_* = T_o + Q/(c\cdot\rho)$ – адиабатическая температура, устанавливающаяся после полного сгорания смеси, Q – тепловой эффект реакции, E – энергия активации химической реакции, k_σ – коэффициент чувствительности скорости реакции к работе напряжений (параметр A – его безразмерный аналог). δ– коэффициент связанности, который в отличие от теории термоупругости вычисляется при температуре, характерной для процесса химического превращения.

Эволюция температуры в точке x=0 (рис. 2) свидетельствует о том, что если скорость реакции не зависит от работы напряжений (кривая 1), то на кривой можно выделить время «зажигания», или время начала превращения, τ_i^0. Если $A \neq 0$, то время начала превращения на температурной кривой четко выде-

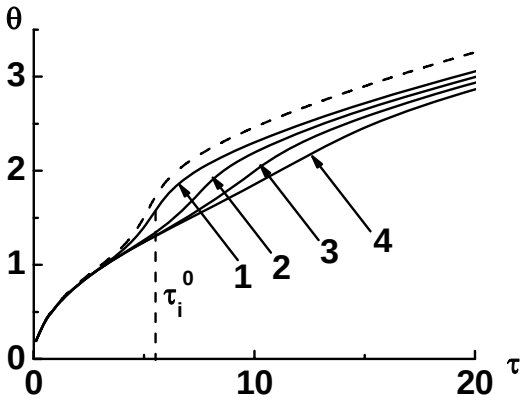


Рис. 2. Эволюция температуры поверхности. 1– A=0, 2– A=5, 3– A=10, 4– A=15; δ=0.03.

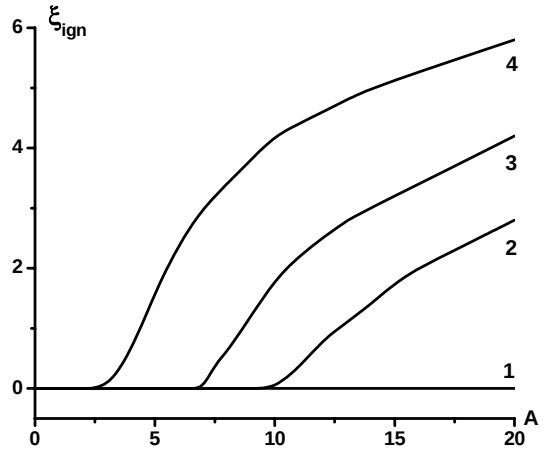


Рис. 3. Влияние параметров A, δ на координату точки инициирования химической реакции. 1–δ=0.01, 2–δ=0.02, 3–δ=0.03, 4–δ=0.06.

лить не удается. По-видимому, приложенная нагрузка препятствует бурному росту температуры и, как следствие, росту степени превращения при инициировании реакции, что приводит к растягиванию процесса во времени.

Существенное влияние оказывает коэффициент связанности δ. С его увеличением координата инициирования реакции смещается вглубь, как это показано на рис. 3. При δ≤0.01 инициирование всегда происходит на поверхности.

Четвертый раздел посвящен исследованию влияния характера НДС на режимы твердофазного превращения в пластине. Рассматриваются три варианта: жесткая заделка пластины по всему контуру, одноосное растяжение, сдвиг. Используется приближение обобщенного плоского напряженного состояния в двумерной постановке. Для решения задачи о механическом равновесии использован метод последовательной верхней релаксации (Янга). Для решения уравнения теплопроводности использована схема переменных направлений. Полученная система конечно-разностных уравнений решена с помощью метода прогонки. Для решения уравнения химической кинетики использована явно-неявная разностная схема.

Для анализа процесса выбрана интегральная характеристика $\langle Y \rangle = \frac{1}{L \cdot h} \int_0^L \int_0^h Y \, d\xi d\eta$, где L и h – длина и ширина пластины. На кривых $\langle Y \rangle(\tau)$

(рис. 4) можно выделить период индукции (I), в течение которого степень превращения ничтожно мала, стадию начального ускорения процесса (II), стадию замедления (III) и ускорение реакции на завершающей стадии (IV). Для практических исследований большое значение имеет такая характеристика как время полупревращения $\tau_{0.5}$, которое легко определить с помощью кривых $\langle Y \rangle(\tau)$, как показано на рис. 4. Обнаружено, что в разных условиях нагружения режимы превращения различны. Наиболее неоднородные поля температуры и степени превращения наблюдаются в случае одноосного растяжения.

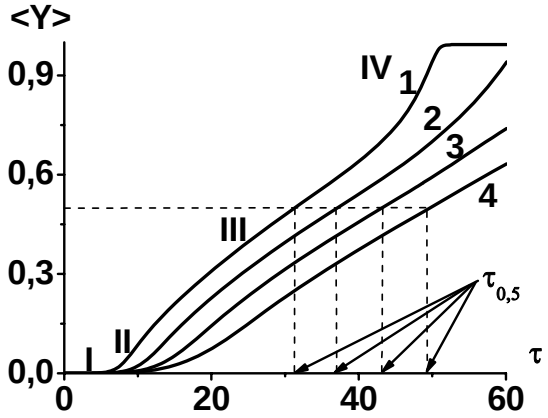
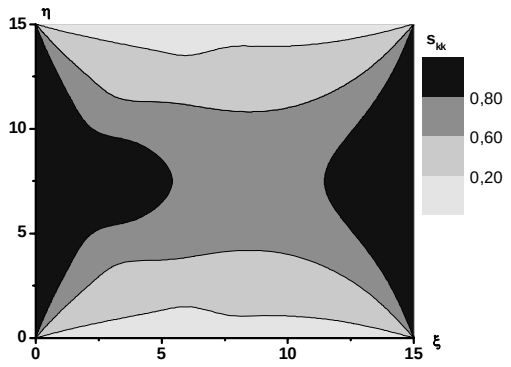


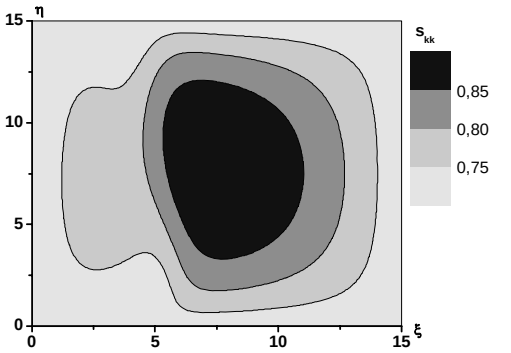
Рис. 4 Изменение со временем средней степени превращения в случае одноосного растяжения. δ=0.03, 1–*A*=5, 2–*A*=10, 3–*A*=15, 4–*A*=20.

Разные режимы превращения непосредственно связаны с различным характером НДС. Это иллюстрируют рис. 5–6. Искривление изолиний первого инварианта тензора напряжений при одноосном растяжении (рис. 5, а) и сдвиге (рис. 5, б) в средней части пластины связано с протеканием в этой зоне интенсивных химических превращений. Если к пластине не приложена внешняя нагрузка, то подобная картина выражена слабо (рис. 5, в).

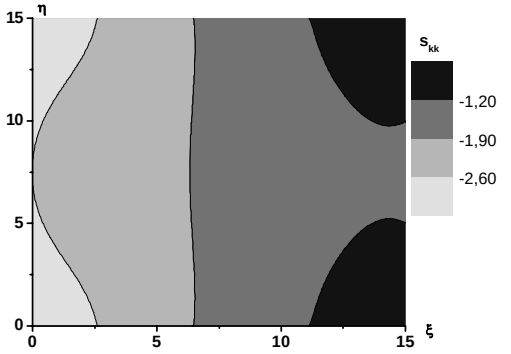
Максимальные значения растягивающих напряжений локализуются в средней части пластины при сдвиге (рис. 5, в) и вблизи нагружаемых поверхностей при одноосном растяжении (рис. 5, а). В случае жесткой заделки в углах пластины при малых значениях ξ возникают и локализуются сжимающие напряжения (рис. 5, в), при этом по абсолютной величине они превышают напряжения, возникающие в образце при растяжении и сдвиге.



а

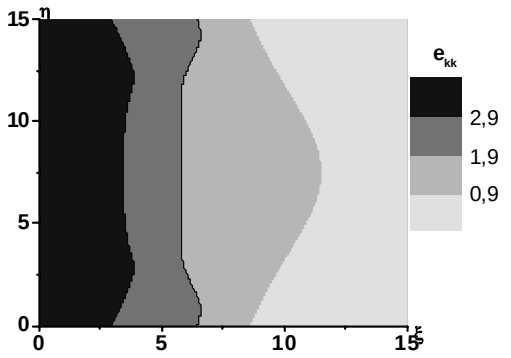


б

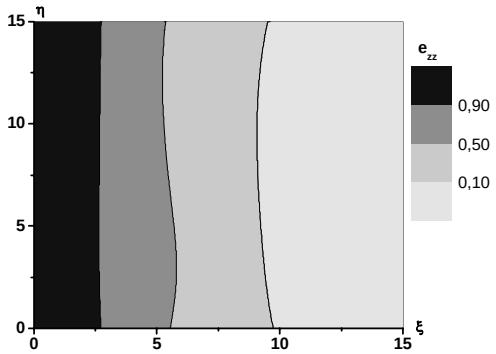


в

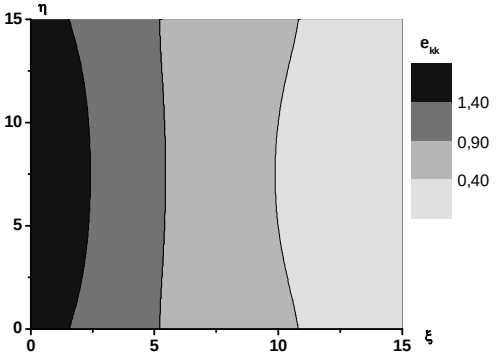
Рис. 5. Первый инвариант тензора напряжений в случае одноосного растяжения (а), сдвига (б) и жесткой заделки (в).



а



б



в

Рис. 6. Первый инвариант тензора деформаций в случае одноосного растяжения (а), сдвига (б) и жесткой заделки (в).

Что касается поля деформаций, здесь основную роль играет изменение свойств в ходе химической реакции, за что отвечает параметр g (относительное изменение объема в ходе реакции). При отсутствии реакции в условиях одноос-

ного растяжения наибольшие деформации, равно как и напряжения, возникали бы в области нагружаемых поверхностей: $\xi \approx 0$, $\xi \approx 15$. Однако из рис. 6, а следует, что основной вклад в возникающие деформации вносит химическое превращение, и с ростом координаты ξ деформации в среднем убывают. Подобная картина наблюдается и в остальных случаях (рис. 6, б, в).

Следует отметить, что даже в том случае, когда внешняя приложенная нагрузка соответствует условиям чистого сдвига, в связанной постановке задачи чистый сдвиг не наблюдается.

В пятом разделе на основе результатов предварительных исследований (разделы 3–4) сформулирована и численно реализована модель синтеза интерметаллического соединения в условиях НДС, реализуемого в процессе экструзии через коническую пресс-форму (рис. 7).

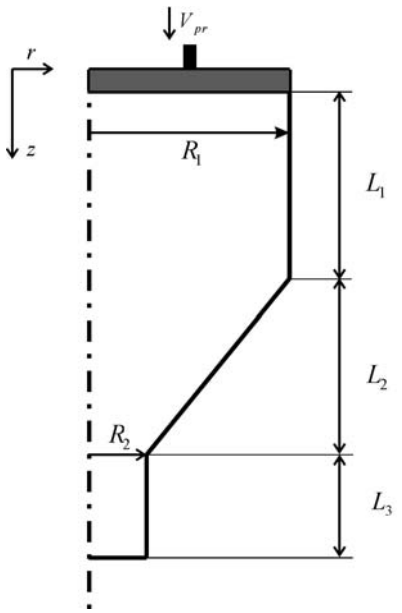
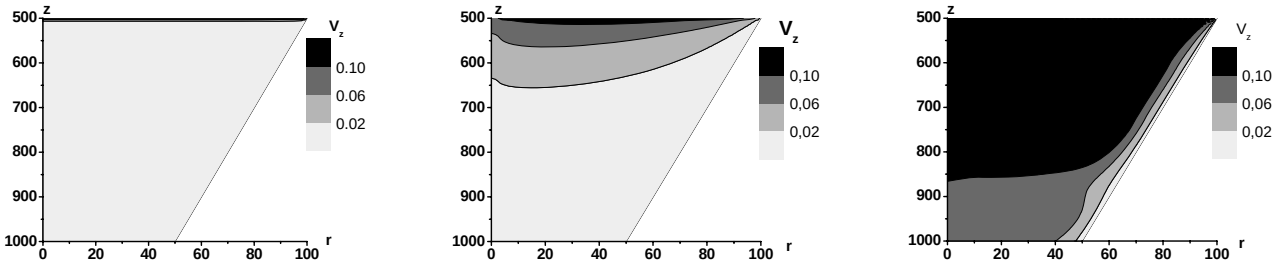


Рис. 7. Иллюстрация к постановке задачи.

Рассматривается цилиндрическая камера с конической выходной частью, материал выдавливается в цилиндрический насадок. В качестве реакционной смеси выбран порошок 3Ni+Al. В камере инициируется экзотермическая химическая реакция за счет нагрева стенок камеры в течение заданного времени, происходит формирование продукта реакции, после чего начинается выдавливание смеси веществ, содержащихся в камере, прессом. После завершения химической реакции система остывает, что описывается в соответствии с законом Ньютона. Задача является осесимметричной, сформулирована в двумерной постановке в цилиндрической системе координат. Модель включает уравнения движения смеси, уравнение неразрывности; уравнение теплопроводности и химической кинетики.

В настоящей работе проанализировано влияние различных реологических соотношений, соответствующих материалам с разными реологическими свойствами, на распределения температуры, степени превращения, компонент тензоров напряжений, деформаций и скоростей при варьировании геометрических размеров камеры, условий нагрева и нагружения. В гипоупругой модели при-

ращения компонент тензора напряжений линейно связаны с приращениями компонент тензора деформаций, приращениями температуры и степени превращения подобно (1). В модели вязкой среды известная аналогия между компонентами тензоров напряжений и деформаций распространена на внутренние напряжения, вызванные неравномерным нагревом и изменением свойств в ходе реакции, что отражено в (2). Вязкоупругая модель учитывает все названные эффекты. Исследованы связанные и несвязанные варианты моделей. Для решения полученных уравнений параболического типа (теплопроводности, движения в случае вязкой и вязкоупругой моделей) использовался метод переменных направлений, для уравнений эллиптического типа (движения в случае гипоупругой модели) использовался метод последовательной верхней релаксации. В случае вязкоупругой модели не удается единым алгоритмом работать в широкой области изменения параметров задачи, поэтому расчеты ограничивались той областью изменения параметров, при которых уравнения остаются параболического типа.



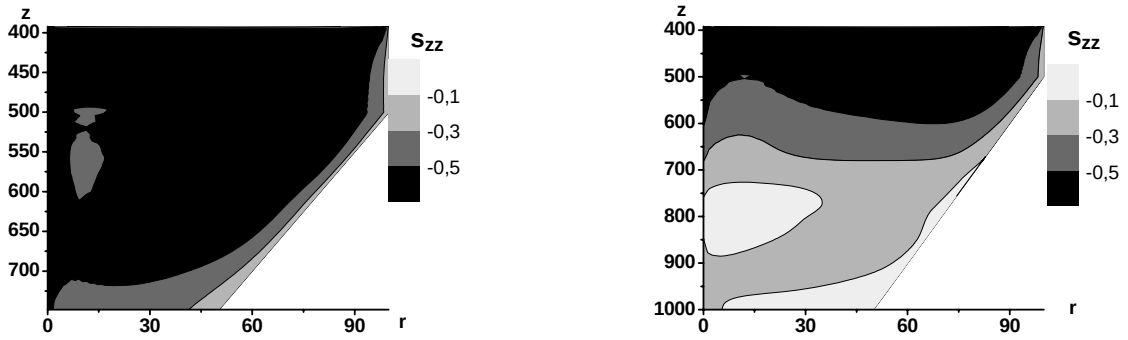
а *б* *в*

Рис. 8. Поле компоненты скорости V_z, а – вязкая модель,
б – гипоупругая модель, в – вязкоупругая модель.

Наиболее отчетливо различие моделей проявляется на примере компоненты скорости V_z. На рис. 8 приведено распределение скорости в момент, когда пресс полностью прошел цилиндрическую камеру для вязкой (а), гипоупругой (б) и вязкоупругой (в) моделей.

В процессе протекания реакции немалое значение играет параметр, характеризующий изменение объема в ходе реакции. Если реакция идет с увеличением объема, то в области интенсивных химических превращений имеют место наибольшие деформации сжатия.

Для реальных технологических процессов экструзии представляет интерес выбор геометрических размеров пресс-формы. Расчеты показывают, что чем больше отношение R_1/R_2 (либо чем больше угол конической распушки матрицы γ) тем сильнее деформируется материал камеры. С одной стороны, это может привести к уменьшению размера зерна и в перспективе – к получению материала с ультрамелкозернистой структурой. С другой стороны, помимо увеличения степени деформирования материала наблюдается рост внутренних напряжений, который может привести к появлению дефектов в материале. Это иллюстрирует рис. 9. В первом случае (рис. 9, а) угол распушки матрицы $\gamma = 22°$, средние напряжения составляют $< s_{zz} >= -0.56$, во втором случае (рис. 9, б) $\gamma = 11°$, а средние напряжения $< s_{zz} >= -0.30$.



а *б*

Рис. 9. Влияние геометрии камеры на возникающие напряжения,
а – $\gamma = 22°$, б – $\gamma = 11°$.

Для выбора минимального времени нагрева, при котором произойдет устойчивое воспламенение смеси, решалась задача о зажигании с боковых поверхностей. Обнаружено, что время воспламенения значительно уменьшается с ростом температуры горячей стенки; учет связанности приводит к увеличению необходимого времени нагрева; с ростом скорости пресса увеличиваются деформации материала.

При варьировании параметров задачи обнаружены различные режимы уплотнения смеси: режим предельного уплотнения и режим недопрессовки, которые наблюдаются экспериментально. Минимальное значение пористости,

полученное в процессе численного счета при варьировании параметров модели в широких пределах, составляет δ_p=0.13.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. На основе теоретического аппарата механики сплошной среды, термодинамики и химической кинетики разработаны одно- и двумерная связанные модели процесса твердофазного превращения при различных условиях квазистатического нагружения.

2. Разработан алгоритм численного исследования связанных моделей. Проведено их подробное параметрическое исследование. Проиллюстрировано качественно различное влияние граничных условий в виде одноосного растяжения, сдвига, а также жесткой фиксации на протекание твердофазной химической реакции в пластине и на характер НДС пластины с химической реакцией. Продемонстрировано, что если не учитывать связанный характер тепловых и механических процессов, то координата инициирования реакции всегда располагается на поверхности, на которую падает тепловой поток. При увеличении коэффициента связанности координата инициирования реакции смещается вглубь вещества.

3. Исследовано влияние связанности тепловых и механических процессов на режимы превращения и эволюцию полей напряжений и деформаций в условиях одноосного растяжения, сдвига и жесткой заделки торцов. Показано, что учет связанности тепловых и механических полей оказывает существенное влияние на развитие превращения, а внутренние напряжения, возникающие в ходе реакции, могут достигать величины, сравнимой с приложенной внешней нагрузкой.

4. Разработана и численно реализована связанная модель процесса высокотемпературного синтеза, совмещенного с плунжерной экструзией смеси через коническую матрицу; на ее основе даны рекомендации к выбору технологических параметров, обеспечивающих наиболее благоприятные условия протекания процесса.

5. Исследована эволюция НДС в процессе синтеза для различных реологических моделей. Наибольшее изменение НДС в зоне химической реакции на-

блюдается в рамках обобщенной вязкоупругой модели среды, в которой учитывается изменение объема в ходе химической реакции. Напряжения и деформации в образце растут с увеличением угла конической распушки матрицы и скорости движения пресса. Выявлены режимы неполного превращения и различные режимы уплотнения смеси, наблюдаемые экспериментально.

Список цитируемой литературы

1. Бутягин П.Ю. Проблемы и перспективы механохимии / П.Ю. Бутягин // Успехи химии. – 1994. – Т. 63, № 12. – С. 1031–1043.

2. Эмануэль Н.М. Курс химической кинетики / Н.М. Эмануэль, Д.Г. Кнорре. – М. : Высшая школа, 1984. – 463 с.

Список публикаций по теме диссертации

Статьи в журналах, рекомендованных ВАК

1. ***Евстигнеев Н.К.*** Исследование влияния внешней нагрузки на режимы твердофазного превращения в условиях чистого сдвига / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Известия ВУЗов. Физика. – 2009. – № 12/2. – С. 47–50.

2. ***Евстигнеев Н.К.*** Двумерная модель твердофазного химического превращения в тонкой пластине в условиях одноосного растяжения и чистого сдвига / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Известия Томского политехнического университета. – 2010. – Т. 316, № 2. – С. 102–107.

3. ***Евстигнеев Н.К.*** Нестационарная модель распространения твердофазного химического превращения в условиях одноосного нагружения / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Физика горения и взрыва. – 2010. – Т. 46, № 3. – С. 75–83.

Публикации в других научных изданиях

4. Князева А.Г. Диффузия и превращения в условиях одноосного нагружения / А.Г. Князева, М.А. Миколайчук, ***Н.К. Евстигнеев*** // XXXIII Дальневосточная математическая школа-семинар имени академика Е.В. Золотова : тезисы докладов. 29 августа – 4 сентября, 2008. – Владивосток : Дальнаука, 2008. – С. 205–206.

5. ***Евстигнеев Н.К.*** Протекание твердофазной химической реакции в пла-

стине в условиях нагружения / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // XVII Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов : тезисы докладов. 1–4 октября 2008 г. – Пермь, 2008. – С. 31–32.

6. ***Evstigneev N.K.*** Spreading of a solid-phase chemical reaction in a plate subjected to mechanical loading / N.K. Evstigneev, A.G. Knyazeva // Advanced Problems in Mechanics. APM'2009 : book of abstracts of XXXVII Summer School. June, 30 – July, 5. – St. Petersburg, 2009. – P. 35–36.

7. ***Евстигнеев Н.К.*** Моделирование связанной задачи зажигания пластины в условиях механического нагружения / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Физика и химия высокоэнергетических систем : сборник материалов Пятой Всероссийской конференции молодых ученых (22-25 апреля 2009, г. Томск). – Томск : ТМЛ-Пресс, 2009. – С. 297–300.

8. ***Евстигнеев Н.К.*** Связанная модель инициирования твердофазной химической реакции в пластине в условиях механического нагружения / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Международная конференция по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов : тезисы докладов. 7–11 сентября 2009 г. / ИФПМ СО РАН. – Томск, 2009. – С. 116 – 117.

9. ***Евстигнеев Н.К.*** Исследование влияния внешней нагрузки на режимы твердофазного превращения в условиях чистого сдвига / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Физика и химия наноматериалов : сборник материалов II Международной школы-конференции молодых ученых (12–16 октября 2009 г., Томск). – Томск : ТМЛ-Пресс, 2009. – С. 201–205.

10. ***Евстигнеев Н.К.*** Моделирование твердофазного превращения в пластине в различных условиях нагружения / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Проблемы нелинейной механики деформируемого твердого тела : труды Второй международной конференции. Казань, 8–11 декабря 2009 г. / науч. ред С.А. Кузнецов ; Казан. гос. ун-т. – Казань, 2009. – С. 154–157.

11. ***Евстигнеев Н.К.*** Взаимовлияние тепловых и механических процессов при протекании в твердой фазе химического превращения в условиях нагружения / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Забабахинские научные чтения : сборник материалов X Международной конференции 15–19 марта 2010. – Снежинск :

Изд-во РФЯЦ-ВНИИТФ, 2010. – С. 205.

12. Knyazeva A.G. Interrelations between heat and mechanical processes during solid phase chemical conversion under loading / A.G. Knyazeva, ***N.K. Evstigneev*** // Procedia Computer Science. – 2010. – Vol. 1, iss. 1. – P. 2613–2622.

13. ***Евстигнеев Н.К.*** Численное исследование влияния реологических свойств среды на режимы превращения в условиях экструзии через коническую пресс-форму / Н.К. Евстигнеев, А.Г. Князева // Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике : тезисы докладов VII международной конференции. Новосибирск, 23–27 августа 2010 г. / ИГиЛ СО РАН. – Новосибирск, 2010. – С. 103–104.