

**Критерій проходження реакції високотемпературного синтезу,
що самопоширюється, у наночастинованих фольгах в умовах зовнішнього
тепловідведення (мезоскопічна модель)**

О.А. Марченко*, Т.В. Запорожець

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького,
буль. Шевченка, 81, 18031 Черкаси, Україна*

(Одержано 26.02.2013, опубліковано online 17.10.2013)

Мезоскопічну модель, яка дозволяє прослідкувати конкуренцію фазоутворення в системі NiAl згідно з рівноважною діаграмою стану, використано для дослідження критерію горіння/гасіння реакції ВСС у багатошарових фольгах з нанометричним періодом мультишару в умовах зовнішнього тепловідведення. Тепловідведення реалізовано двома способами: за аналітичною формулою і прямим моделюванням тепловідвідних пластин. Досліджено залежність швидкості тепловідведення від ефективності реакції ВСС.

Ключові слова: Реакційна дифузія, Неізотермічний режим, Наноплівки, Багатошарова фольга, Діаграма стану, Мезоскопіка.

PACS numbers: 68.65.Ac, 66.30.Ny, 66.30.Pa, 61.72.Cc

1. ВСТУП

Сучасні технології дозволяють виготовляти мікронні фольги з почережними нанорозмірними прошарками різних компонентів методами вакуумного осадження [1] і магнетронного розпилення [2] на охолоджену підложку. Якщо при цьому використовують системи компонентів, у яких дифузійне фазоутворення супроводжується ефективними екзотермічними реакціями (наприклад, NiAl, TiAl, TiSi, MoB і т.д.), то спостерігається явище високотемпературного синтезу, що самопоширюється, (ВСС) або, інакше, явище безгазового (твердофазного) горіння [3]. Для ініціювання реакції достатньо локального підігріву, щоб активізувати дифузійний процес, а подальший прогрів сусідньої ділянки забезпечує тепловиділення у результаті хімічної реакції.

Очевидно, що при напиленні на плоску підложку можна краще контролювати стехіометричний склад суміші і, відповідно, у результаті високотемпературного синтезу отримувати якісніші інтерметалідні сполуки порівняно з порошковими системами, в яких навіть при ретельному перемішуванні й пресуванні залишаються зони неоднорідності по концентрації. Крім того, підбором товщини та періоду мультишарів у фольгах можна досягти не лише бажаної локальної концентрації, а й регулювати тепловиділення та швидкість реакції.

Одним із практичних застосувань багатошарових фольг з наноперіодом мультишарів може бути локальне зварювання або зварювання у безкисневому просторі [4]. При цьому важливо враховувати, що контакт зі зварюваними поверхнями забезпечує активне тепловідведення, яке може привести до зміни фазової структури фронту горіння, геометрії фронту, вплинути на стійкість фронту реакції [5] аж до її згасання (якщо теплового виходу хімічної реакції буде недостатньо для прогріву сусідніх ділянок і підтримки реакції). Аналітичні оцінки показали існу-

вання порогу горіння / гасіння, який залежить від характеристик фольги та щільності контакту між фольгою і зварюваними поверхнями. Тепловий вихід реакції впливає і, безпосередньо, на розігрів, і на швидкість фронту. У роботі [6] без урахування особливостей фазоутворення було показано, що ступінь зниження тепловідведення визначається швидкістю реакції: чим повільніше протікає реакція, тим довше проходить фронт через дану точку, тим більше відводиться тепла за час проходження фронту, тим більше падає температура. Очевидно, у цій самоузгодженій схемі характер протікання реакції визначається тепловиділенням у результаті фазоутворення. Враховуючи, що дифузійні системи часто мають складні фазові діаграми з чергуванням екзо- та ендотермічних реакцій, потрібно враховувати їх конкуренцію [7]. При цьому аналітичний опис ВСС-процесу суттєво ускладнюється, тому доцільним є дослідження конкурентного утворення кількох фаз за допомогою мезоскопічної моделі. У роботі [8] одним зі співавторів описано мезоскопічну модель екзотермічної ВСС-реакції у багатошарових наноплівках без урахування тепловідведення через зовнішні поверхні. Оскільки тепловідведення при контакті з високотеплоємним матеріалом (наприклад, зварюваними поверхнями) може стати контролюючим фактором, то у даній роботі ми пропонуємо розвиток мезоскопічного підходу для дослідження порогу горіння/гасіння у системі фольга/пластини (Рис. 1а). Ефективність тепловідведення на інтерфейсі фольги з пластиною визначатиметься якістю контакту, яка залежить не лише від теплоємності матеріалу пластини, а й від шорсткості поверхонь та сили стиснення.

Згідно з теорією Я. Б. Зельдовича, втрата тепла під час горіння може бути обумовлена випромінюванням, конвекцією та кондуктивною теплопровідністю [9]. Для системи фольга / пластини доцільно розглядати лише кондуктивну складову через розв'язок рівняння теплопровідності у неперервній системі

* oksana_ostashevska@ukr.net

фольга/пластини з урахуванням коефіцієнтів температуропровідності матеріалів та контактної зони. Якість реального контакту визначається ступенем притискання пластин до фольги та шорсткістю поверхонь. На жаль, ми не маємо можливості ці характеристики кількісно співставити з модельним безрозмірним параметром η , який визначає ефективність теплопередачі на межі поверхонь у нашій моделі. Він називається коефіцієнтом ефективності контакту ($\eta = 0$ відповідає відсутності контакту, $\eta = 1$ забезпечує ідеальний контакт). Саме так вводиться характеристика, яка враховує шорсткість і силу стиснення системи фольга/пластини у теоретичній роботі [6]. Також у роботі [6] пропонується критерій гасіння, який пов'язує введену характеристику η і товщину фольги H :

$$\eta = \frac{\sqrt{\pi}H}{\alpha_{pl}^2} U, \tag{1}$$

де $H = M \times 4l$ (кількість мультишарів M з періодом $4l$), α_{pl}^2 – коефіцієнт температуропровідності пластин, U має розмірність швидкості та трактується як швидкість тепловідведення. Умовою для гасіння реакції при фіксованій товщині фольги є збільшення коефіцієнту тепловіддачі або при фіксованому коефіцієнті тепловіддачі зменшення товщини фольги.

Запропонована у даній роботі мезоскопічна модель дає змогу перевірити феноменологічно передбачений критерій (1) та прогнозувати вплив зовнішнього тепловідведення на проходження реакції ВСС. Для цього у моделі узгоджено розв'язуються чотири підзадачі: теплопереносу, дифузії, тепловиділення при фазоутворенні, врахування зовнішнього тепловідведення.

Перевагою мезоскопічного підходу є можливість (1) враховувати різні часові та просторові масштаби протікання реакції та (2) описати необмежену кількість фаз з будь-якою послідовністю фазоутворення згідно з дискретизованою по температурі та концентрації фазовою діаграмою. Автори розуміють, що для опису фазоутворення при нерівноважному (а інколи й нестационарному) процесі ВСС необхідно використовувати нерівноважну діаграму стану. Технічна модернізація моделі у цьому напрямі не є складною, але бракує термодинамічних параметрів для неперервного відтворення фазоутворення у широкому діапазоні температур і концентрацій.

2. ОПИС МОДЕЛІ

Для спрощення рівнянь та оптимізації обчислень розглядається двовимірний модель: вісь абсцис співпадає з напрямом поширення фронту реакції ВСС, вісь ординат направлена перпендикулярно до площини фольги (Рис. 1а). Вздовж третього (ортогонального) напрямку, що лежить у площині фольги, і паралельно до фронту (за умови плоскої зони підпаду), картина змінюватися не буде. Це дозволило перейти до двовимірної моделі (x – «напрямок поширення фронту», y – «товщина фольги»).

При моделюванні фольги розглядався один мультишар компонентів А і В (Рис. 1б), а багатошаро-

вість забезпечувалася періодичними граничними умовами по осі y . Розбиття зразка на комірки та приписування концентрації й температури кожній комірці, як єдиному цілому, реалізувало мезоскопічний підхід.

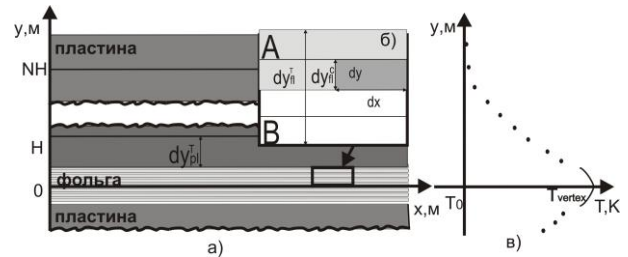


Рис. 1 – Геометрія модельного зразка

Зміна температури у комірці зумовлена дифузійною реакцією вздовж напрямів x та y з характерним часом dl^2/D , де dl – лінійний розмір комірки. Аналогічно, характерний час перерозподілу тепла у комірці – dl^2/α_{pl}^2 , де α_{pl}^2 – середній коефіцієнт температуропровідності матеріалу фольги. Оскільки $\alpha_{pl}^2 \gg D$, то рівняння тепло- і масопереносу повинні розв'язуватися у різних часових або просторових шкалах. Враховуючи майже плоский температурний фронт вздовж осі x і незначні градієнти вздовж осі y , можна вважати, що розбиття шкали визначає перерозподіл температури лише по осі x : dx^2/α_{pl}^2 . І навпаки, компоненти бінарної системи чергуються по вісі y з незначними градієнтами по вісі x , тому контроль дискретизації просторової шкали визначає вісь y : dy^2/D . Таким чином, можна використати нерівномірні комірки $dx \times dy$ (Рис. 1б) зі співвідношенням сторін, визначеним співвідношенням коефіцієнтів дифузії та температуропровідності. Елементарні оцінки показують, що абсолютний розмір таких комірок не повинен перевищувати мікронів вздовж напрямку поширення тепла і нанометрів вздовж напрямку дифузії для достатньої деталізації проміжних фаз.

Кожна мезокомірка (x, y) у кожен момент часу t характеризується температурою T і концентрацією C . Вона може перебувати в одно- або двофазному стані відповідно до дискретизованої фазової діаграми досліджуваної системи (Рис. 2).

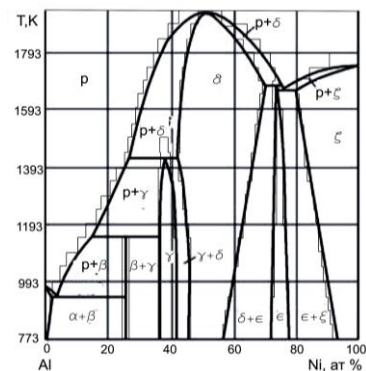


Рис. 2 – Табульована діаграма стану NiAl

2.1 Перерозподіл речовини

Для розв'язку рівняння дифузії застосовується теорія Онзагера (міжфазні границі не вводяться у явному вигляді):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{L} \frac{\partial g'}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\tilde{L} \frac{\partial g'}{\partial y} \right), \quad (2)$$

де $\tilde{L} \frac{\partial g'}{\partial l}$ визначає потік по відповідній осі l , пропорційний різниці хімічних потенціалів ($\mu_j - \mu_i$) ($j > i$) у сусідніх комірках i та j , стінка між якими характеризується проникністю $\tilde{L}_{i,j}$. Проникність кожної i -ої комірки визначається через концентрацію C_i , коефіцієнт дифузії D_i та температуру T_i [8]:

$$L_i(C_i) = C_i(1 - C_i)D_i/k_B T_i. \quad (3)$$

У залежності від типу області діаграми стану визначається зміна хімічного потенціалу мезокомірки:

$$g'_i = \begin{cases} \frac{dg_i^{left}}{dc}(C_i), \text{ однофазна область} \\ \frac{g_i^{right}(C_i^{right}) - g_i^{left}(C_i^{left})}{C_i^{right} - C_i^{left}}, \text{ двофазна область} \end{cases}. \quad (4)$$

Рівняння (2) розв'язувалося чисельно для дискретної концентраційної сітки, значення якої відповідали середнім концентраціям комірок розміром $dx \times dy_{pl}^C$ (Рис. 1б), де розбиття $dy_{pl}^C = 4l/10$ забезпечує зміну концентрації у межах мультишару (бінарний мультишар розбивався на 10 підпрошарків).

Початково бінарний прошарок фольги задається ступінчастим концентраційним профілем по осі y . При розв'язуванні рівняння дифузії на модельний зразок по товщині мультишару (вздовж осі y) накладено періодичні граничні умови, що дозволяє описати багатшаровість фольги і суттєво зменшити кількість комірок. Вздовж вісі x крайній лівий ряд комірок має концентрацію результуючої фази після проходження ВСС-реакції (A_1B_1), а концентрації крайнього правого ряду визначаються відповідними початковими концентраціями прошарків компонентів А і В.

2.2 Перерозподіл тепла

Для моделювання перерозподілу температури розв'язується рівняння теплопровідності:

$$c_p \rho \Omega \frac{\partial T}{\partial t} = \Omega \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_{pl} \Omega \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad (5)$$

в якому c_p – питома теплоємність, ρ – густина, Ω – атомний об'єм, κ_{pl} – коефіцієнт теплопровідності фольги. Питома теплоємність, коефіцієнт теплопровідності та густина для фаз прийняті лінійними функціями від концентрацій між чистими компонентами, незалежними від температури.

Враховуючи, що у нанометричному мультишарі

фольги процес перерозподілу тепла набагато швидший, ніж дифузійний ($a_{pl}^2/D \sim 10^6$), можна вважати перерозподіл тепла майже миттєвим і уникнути розв'язування рівняння теплопровідності у фользі перпендикулярно до площини фольги (по вісі y). При відсутності зовнішнього тепловідведення можна вважати, що температура по товщині фольги постійна у мультишарі й, відповідно, у всій товщині фольги. Таким чином, при моделюванні температурного поля у фользі розв'язується одновимірна задача теплопровідності вздовж напрямку фронту реакції для ланцюжка комірок розміром $dx \times dy_{pl}^T$, де $dy_{pl}^T = 4l$, а з урахуванням періодичних граничних умов по вісі y реально $dy_{pl}^T = H$ (Рис. 1б).

Початковий розподіл температури задається розподілом Гауса з максимальним значенням температури T_{init} і дисперсією у межах десяти комірок.

Фольга у напрямі теплоперенесення (вісь x) вважається нескінченною, тобто її довжина є достатньою для того, щоб при поширенні ВСС-реакції на правому кінці забезпечити температуру навколишнього середовища T_0 .

2.3 Тепловиділення при фазоутворенні

На кожному ітераційному кроці перевірялася можливість переходу комірки в іншу фазу або двофазну область при зміні температури і/або концентрації комірки. Якщо такий перехід відбувався, то враховувався тепловий ефект у результаті металохімічної реакції, як зміна термодинамічного потенціалу Δg^{local} , який було вираховано зі стандартних термодинамічних співвідношень [10]. Оскільки тепловий ефект визначається в об'ємі окремої мезокомірки, то його урахування в масштабі мультишару і всієї фольги здійснюється шляхом перерахунку виділеного у даній комірниці тепла у зміну температури $\Delta T^{local} = -\Delta g^{local} / (10 \cdot c_p \rho \Omega)$.

2.4 Зовнішнє тепловідведення

Для системи фольга / пластини потрібно враховувати теплообмін між поверхнями фольги та пластини з коефіцієнтом ефективності контакту η . Це можна реалізувати безпосереднім моделюванням пластин (Модель 1) або розраховуючи тепловідведення за аналітичною формулою (Модель 2).

Модель 1. Реалізація тепловідведення шляхом моделювання пластин.

Для моделювання тепловідведення у пластинах необхідно розширити температурну сітку і розв'язувати рівняння теплопровідності одночасно у фользі та пластинах з урахуванням коефіцієнта ефективності контакту поверхонь. Для узгодження з реальними експериментами товщина пластин повинна на кілька порядків перевищувати товщину фольги. Оскільки всі мультишари у поперечному до фронту напрямі мають однакову температуру, то розбиття по осі y у пластинах може дорівнювати товщині фольги $dy_{pl}^T = H$. Цей вибір забезпечить рівномірність шкали у всьому модельному зразку «фо-

льга + пластини». Таким чином, у Моделі 1 по товщині фольги використовуються дві шкали по вісі y : для розв'язку рівняння дифузії дрібна з лінійним розміром dy_{pl}^C , а для розв'язку рівняння теплопровідності крупніша – dy_{pl}^T (Рис. 1а).

Однак припущення про постійність температури по товщині фольги при наявності зовнішнього тепловідведення має і негативні наслідки: температура біля поверхонь фольги може не встигати вирівнюватися по товщині фольги, тому температурний профіль вздовж осі y не можна вважати плоским. Щоб уникнути моделювання всіх мультишарів (а їх кількість може сягати тисячі), використано аналітичний підхід для опису нерівномірності температурного профілю по товщині фольги. Для кожного перерізу поперечний профіль температури у фользі представлено у виді параболи (Рис. 1в):

$$T_f^{an}(x, y) = T_{vertex}(x) - by^2. \quad (6)$$

Для визначення коефіцієнта b використано з роботи [6] оцінку густини теплового потоку через одиницю площі поверхні фольги. Густина є обернено пропорційною ширині фронту:

$$j_Q^y = \frac{\kappa_{pl} \cdot \eta}{2\sqrt{\pi}} \frac{T_f - T_0}{L_f}. \quad (7)$$

де $L_f = \tau_f \cdot V_f \gg H$ – ширина фронту реакції, T_f – максимальна температура у фронті, κ_{pl} – коефіцієнт теплопровідності пластин. Якщо $H \geq L_f$, то тепловідведення контролюватиметься процесом тепловідведення у фользі з густиною потоку:

$$j_Q^y = 3\kappa_{pl} \cdot \eta (T_f - T_0) / H. \quad (7')$$

Після низки математичних перетворень отримано універсальний для обох випадків коефіцієнт b :

$$b = \frac{\kappa_{pl} \frac{\bar{T}_f(x) - T_0}{2\sqrt{\pi}L_f}}{\kappa_{pl}H + \frac{\kappa_{pl}H^2/6}{2\sqrt{\pi}L_f}}, \quad (8)$$

де T_{vertex} – температура у вершині параболи, $\bar{T}_f(x)$ – середня температура у фользі, L_f визначається як середня квадратична дисперсія температурного профілю.

У результаті запропонованого параболічного перерозподілу температури у фользі (Моделі 1) можна використовувати єдину температурну сітку у фользі та пластині з розміром комірок $dx \times dy_{pl}^T$. Зміна температури у фользі ($y = 0$) визначається як:

$$\left. \frac{\partial T(x)}{\partial t} \right|_{y=0, \text{ in foil}} = \frac{\Omega_{pl} \cdot \kappa_{pl}}{3k_B} \times \left[\left. \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} \right|_{y=0} - 6\eta \frac{\partial}{\partial y_{pl}^T} \left(\left. \frac{\partial T(x)}{\partial y_{pl}^T} \right|_{y=0} - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial T(x)}{\partial y_{pl}^T} \right|_{y=H} \right) \right] \quad (9)$$

Для комірок пластини, які межують з фольгою ($y = H$), рівняння теплопровідності матиме вид:

$$\left. \frac{\partial T(x)}{\partial t} \right|_{y=H} = \frac{\Omega_{pl}}{3k_B} \cdot \left[\kappa_{pl} \left. \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} \right|_{y=0} + \kappa_{pl} \left. \frac{\partial^2 T(x)}{(\partial y_{pl}^T)^2} \right|_{y=H} + 6 \cdot \kappa_{pl} \cdot \eta \cdot \frac{\partial}{\partial y_{pl}^T} \left(\left. \frac{\partial T(x)}{\partial y_{pl}^T} \right|_{y=0} - \frac{1}{2} \left. \frac{\partial T(x)}{\partial y_{pl}^T} \right|_{y=H} \right) \right] \quad (10)$$

Зміна температури у комірках пластин ($y > H$) розраховується як:

$$\left. \frac{\partial T(x)}{\partial t} \right|_{y>H, \text{ in plate}} = \frac{\Omega_{pl} \cdot \kappa_{pl}}{3k_B} \left[\left. \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} \right|_{y>H} - \left. \frac{\partial^2 T(x)}{(\partial y_{pl}^T)^2} \right|_{y>H} \right] \quad (11)$$

Початковий розподіл температури у фользі задається розподілом Гауса. Температура пластин на початку реакції дорівнює температурі навколишнього середовища T_0 . Також контролюється температура у зовнішній N -ій комірці пластини, щоб вона залишалася рівною температурі навколишнього середовища в межах похибки обчислень.

Модель 2. Тепловідведення за аналітичною формулою.

Очевидно, що розрахунок температурного поля пластин у Моделі 1 вимагає збільшення машинного часу моделювання. Шукаючи шляхи оптимізації розрахунків, ми описали вплив пластин аналітичною формулою аналогічно до роботи [6] та оцінили коректність її застосування, порівнявши з результатами Моделі 1. Для визначення градієнта температури на інтерфейсі фольга/пластини оцінюється тепловідведення лише за час проходження фронту τ_f , оскільки на інтенсивність реакції та швидкість руху фронту температура впливає лише безпосередньо на часовому інтервалі τ_f . При цьому ширина фронту L_f у формулі (8) може бути визначена через аналітичну оцінку швидкості, яка, в свою чергу, визначається температурою фронту $V_f(T_f)$.

Таким чином, формули (9)-(11) зводяться до розв'язування рівняння теплопровідності лише у ланцюжку комірок фольги вздовж вісі x з урахуванням зовнішнього тепловідведення через параболічне наближення (6), (8):

$$\left. \frac{\partial T(x)}{\partial t} \right|_{y=0, \text{ in foil}} = \frac{\Omega_{pl} \cdot \kappa_{pl}}{3k_B} \left(\left. \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} \right|_{y=0} - 2\eta b \right). \quad (12)$$

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Моделювання проводилося для системи NiAl, яка має шість фаз. Діаграму стану NiAl було протабульовано через 50 K з фіксуванням лівої та правої (середньої на цьому температурному інтервалі) концентрації кожної з фаз (Рис. 2).

Досліджувалася порогова поведінка системи в залежності від товщини фольги та ефективності контакту. При побудові фазової діаграми горіння/гасіння у системі координат H, η для визначеності фіксувалася товщина фольги, а коефіцієнт ефективності контакту у кожному наступному модельному експерименті збільшувався з невеликим кроком, поки не досягалася гасіння.

У Моделі 1 було проведено комп'ютерні експерименти для фольг з періодом мультишару 5 нм та 10 нм і отримано порогові (критичні) значення коефіцієнта ефективності контакту η_{cr} для плівок різної товщини H (Рис. 3, суцільна лінія).

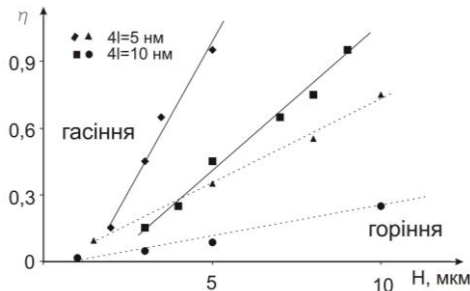


Рис. 3 – Критичні значення коефіцієнта ефективності контакту η_{cr} для плівок різної товщини (суцільна лінія – Модель 1, пунктир – Модель 2)

Залежність коефіцієнта ефективності контакту η_{cr} від товщини фольги H апроксимувалася лінійно у межах похибки дискретного кроку по параметру η ($\Delta\eta_{cr} = 0.01$). Із отриманої залежності (Рис. 3) можна визначити величину, яка характеризує критичну швидкість відведення тепла, після якої відбувається гасіння: $U_{cr} = \eta_{cr} \cdot \alpha_{pl}^2 / (H\sqrt{\pi})$. Основні параметри моделювання $dx = 10$ мкм, $\kappa_{pl} = 46.055$ Вт/мК, $\alpha_{pl}^2 = 3.37 \cdot 10^{-5}$ м²/с, $T_0 = 300$ К, $4l = (2 \div 25)$ нм, $H = (2 \div 25)$ мкм, $T_{init} = 700$ К.

За формулою (1) можна оцінити U_{cr} : для періоду мультишару 5 нм вона становить 5.07 м/с, а для періоду 10 нм – 2.4 м/с. Отже, при збільшенні періоду мультишару фольги швидкість відбирання тепла пластинами зменшується, оскільки дифузійна реакція проходить повільніше [7]. Тому при значно меншій інтенсивності тепловідведення (меншій ефективності контакту) буде наступати гасіння реакції.

Аналогічні результати критичних значень коефіцієнта ефективності контакту $\eta(H)$ для переходу горіння / гасіння у Моделі 2 наведено на Рис. 3 (пунктирна лінія). У цьому випадку залежності теж добре апроксимуються прямою, але мають менші абсолютні значення, причому розбіжність із Моделлю 1 зростає при збільшенні періоду мультишару. Причину розбіжності ми вбачаємо у використанні в аналітичній формулі тепловідведення (12) Моделі 1 ширини фронту ВСС-реакції $L_f \sim d_{pl}^2 / V_f$, яка використовується при оцінці густини теплового потоку (7). Оскільки у модельованих нами системах $H \ll L_f$, то тепловідведення буде завищене. Відповідно, отримані значення η_{cr} будуть менші, ніж при прямому моделюванні з тепловідвідними пластинами (Моделль 1).

Залежність критичної швидкості тепловідведення від періоду мультишару фольги $U_{cr}(4l)$ наведено на Рис. 4: в області над залежністю реакція ВСС гасне. При збільшенні періоду мультишару критична швидкість тепловідведення зменшується за гіперболічною залежністю.

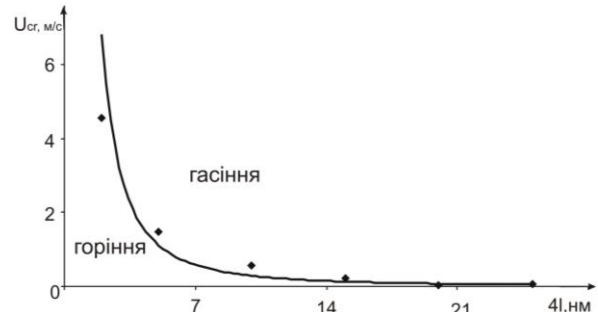


Рис. 4 – Залежність критичної швидкості тепловідведення від періоду мультишару фольги (Моделль 2)

4. ВИСНОВКИ

За допомогою мезоскопічної моделі отримано фазові діаграми горіння / гасіння ВСС-реакції для системи фольга/пластини в умовах зовнішнього тепловідведення. Критична залежність ефективності тепловідведення від товщини фольги $\eta(H)$ має лінійний характер, що узгоджується з аналітичним прогнозом роботи [6].

Збільшення періоду мультишару фольги призводить до гіперболічного зменшення критичної швидкості тепловідведення зовнішніми пластинами, при якій починається гасіння ВСС-реакції.

Аналітичне тепловідведення дає занижені критичні значення ефективності контакту «фольга/пластини», тому доцільним є використання мезоскопічної моделі системи «фольга / пластини» для прогнозування порогових значень гасіння реакції ВСС у фользі при зовнішньому тепловідведенні.

Практичне застосування запропонованого підходу ускладнюється визначенням щільності контакту між фольгою та тепловідвідними пластинами, оскільки у моделі використовується інтегрований відносний показник якості контакту без конкретного урахування шорсткості поверхонь і сили притискання.

ПОДЯКА

Автори висловлюють подяку проф. А. М. Гусаку за поради стосовно аналітичного опису.

Робота частково підтримана Міністерством освіти і науки, молоді та спорту України, Державним фондом фундаментальних досліджень, а також цільовою комплексною програмою фундаментальних досліджень НАН України «Фундаментальні проблеми наноструктурних систем, наноматеріалів, нанотехнологій».

Критерий прохождения реакции самораспространяющегося высокотемпературного синтеза в нанослойных фольгах в условиях внешнего теплоотвода (мезоскопическая модель)

О.А. Марченко, Т.В. Запорожец

*Черкасский национальный университет им. Богдана Хмельницкого,
бул. Шевченко 81, 18031 Черкассы, Украина*

Мезоскопическую модель, которая позволяет проследить конкуренцию фазообразования в системе NiAl согласно равновесной диаграмме состояния, использовано для исследования критерия горение / гашение реакции СВС в многослойных фольгах с наноразмерным периодом мультислоя в условиях внешнего теплоотвода. Теплоотвод был реализован двумя способами: упрощенным, по аналитической формуле, и прямым моделированием теплоотводящих пластин. Исследована зависимость скорости теплоотвода от эффективности реакции СВС.

Ключевые слова: Реакционная диффузия, Неизотермический режим, Нанопленки, Многослойная фольга, Фазовая диаграмма, Мезоскопика.

Passing Criterion for Reaction of Self-Propagating High-Temperature Synthesis in Nanostructured Multilayer Foils in the Conditions of Heat Outflux (Mesoscopic Model)

O.A. Marchenko, T.V. Zaporozhets

Cherkasy National University, Shevchenko blv. 81, 18031 Cherkasy, Ukraine

Mesoscopic model, which allows to trace the competition of phase formation in NiAl system according to the equilibrium state diagram, was used for the investigation of the combustion / quenching criterion for SHS-reaction in nanostructured multilayer foils in the conditions of heat outflux. Outflux is realized by two ways: simplified by analytic formula and direct simulation of outflux plates.

Keywords: Reaction diffusion, Nonisothermal regime, Nanofilms, Multilayer foil, Phase diagram, Mesoscopics.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. A.I. Ustinov, L.O. Olikhovska, T.V. Melnichenko, *Surf. Coat. Tech.* **202**, 3832 (2008).
2. M.E. Reiss, C.M. Esber, D.Van Heerden, A.J. Gavens, M.E. Williams, T.P. Weihs, *Mater. Sci. Eng. A* **261**, 217 (1999).
3. А.Г. Мержанов, А.С. Мукасян, *Твердопламенное горение*, (Москва: Торус Пресс: 2007).
4. В.Н. Санин, В.И. Юхвид, А.Е. Сычев, Н.В. Сачкова, М.Ю. Ширяева, *Неорганические материалы* **45** № 6, 694 (2009).
5. А.Н. Фирсов, К.Г. Шкадинский, *Физика горения и взрыва* **23** № 3, 46 (1987).
6. T.V. Zaporozhets, A.M. Gusak, A.I. Ustinov, *The Paton Welding J. No 8*, 37 (2011).
7. Т.В. Запорожец, А.М. Гусак, А.И. Устинов, *Современная электрометаллургия* **1**, 45 (2010).
8. Т.В. Запорожец, С.А. Полосухіна, *Вісник Черкаського національного університету* **28** (2009).
9. Я.Б. Зельдович, *ЖЭТФ* **11** №1, 159 (1941).
10. А.М. Гусак, А.О. Богатырев, *Металлоф. новейшие технол.* **9**, 52 (1994) (A.M. Gusak, A.O. Bogatyrev, *Metallofiz. Nov. Technol.* **9**, 52 (1994)).