

МОДЕЛЬ ПРОГРЕВА МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ
ЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ С УЧЕТОМ
ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ
В ОКСИДНОМ СЛОЕ

К. А. Авдеев, В. С. Посвянский, С. М. Фролов

ИХФ РАН
г. Москва, Россия

Известно, что оксидная оболочка может в значительной степени влиять на процесс воспламенения частицы металла, причем это влияние неоднозначно: от определяющего (для алюминия [1]) до практически незначительного (для магния [2]).

Различная степень влияния оксидной оболочки на воспламенение и последующее горение частицы металла связана с изменением защитных свойств оболочки по мере прогрева. Например, в начале нагрева частиц алюминия на ее поверхности образуется аморфный оксид [1]. Дальнейшее повышение температуры частицы приводит к его превращению в более плотный кристаллический оксид, и скорость окисления снижается вследствие его более низкой диффузионной проницаемости. В то же время повышение температуры частицы вызывает в плотном слое оксида напряжения [3, 4], которые при определенных условиях (размеры частицы, скорость нагрева) быстро достигают критических значений, и на поверхности оксидной оболочки появляются трещины. В результате защитные свойства оболочки резко снижаются, и частица воспламеняется.

Известные модели [1, 2, 5–7], как правило, либо не учитывают влияния структурных изменений (используют макрокинетические законы окисления) на воспламенение частицы [2, 5–7], либо учитывают влияние одного из факторов, например кристаллизацию оксидной пленки [1]. Однако доминирование одного из перечисленных факторов при воспламенении определяется условиями, в которых протекает процесс. Поэтому важно учитывать возможность раз-

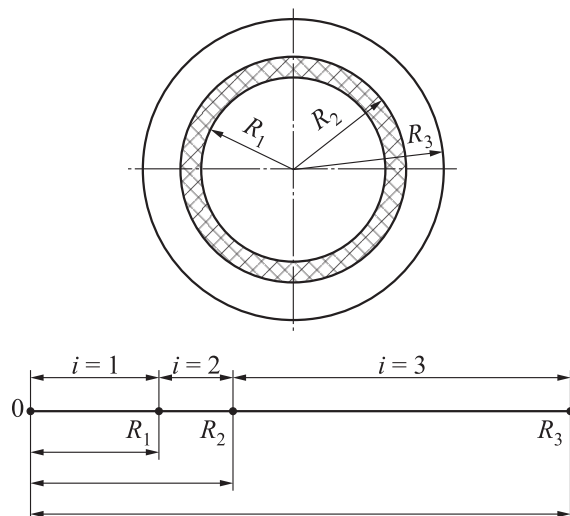


Рис. 1 Двухслойная частица алюминия в газовом объеме и соответствующая расчетная область: R_1 , R_2 и R_3 — радиусы металлического ядра, поверхности частицы и газового объема соответственно

личных направлений развития процесса. Успешное решение этой задачи позволит понять механизм воспламенения частицы металла в условиях топливоздушнoй смеси. С этой целью в данной работе создана модель прогрева двухслойной частицы, позволяющая определить условия, при которых в оксидной оболочке достигаются критические напряжения, вызывающие ее растрескивание.

Математическая модель прогрева двухслойной частицы металла (рис. 1) основана на следующих уравнениях:

- уравнение неразрывности для частиц и оксидной оболочки ($0 < r \leq R_2$):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 w_i}{\partial r} = -\frac{\Pi_i}{\rho_i c_{pi}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} \right] + \Pi_i \frac{w_i}{\rho_i} \frac{\partial T_i}{\partial r}, \quad i = 1, 2; \quad (1)$$

- уравнение неразрывности для газа ($R_2 < r \leq R_3$):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 w_i}{\partial r} = -\frac{w_i}{T_i} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{1}{T_i c_{pi}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} \right], \quad i = 3; \quad (2)$$

– уравнение энергии для составной частицы и газа ($0 < r \leq R_3$):

$$\rho_i c_{pi} \frac{\partial T_i}{\partial t} + \rho_i c_{pi} \frac{w_i}{\rho_i} \frac{\partial T_i}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial r} \right], \quad i = 1, 2, 3; \quad (3)$$

– уравнение состояния идеального газа:

$$p_3 = \rho_3 \frac{R_\mu}{\mu_3} T_3; \quad (4)$$

– уравнение для вычисления напряжения в оксидной оболочке [8]:

$$\sigma_2 = 3(T_2 - T_{02})(\alpha_{T_1} - \alpha_{T_2})E_1 E_2 / \left(E_1 \left((1 + \eta_2) + 2(1 - 2\eta_2)(1 - h_2/R_2)^3 \right) + 2E_2 \left(2(1 - 2\eta_1)(1 - h_2/R_2)^3 \right) \right); \quad (5)$$

– условие постоянства давления:

$$p_i = const, \quad i = 1, 2, 3; \quad (6)$$

– граничные условия:

$$r = 0 : \quad \frac{\partial T_1}{\partial r} = 0, \quad \frac{w_1}{\rho_1} = 0; \quad (7)$$

$$r = R_1 : \quad T_1 = T_2, \quad \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial r} = \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r}, \quad \frac{w_1}{\rho_1} = \frac{w_2}{\rho_2}; \quad (8)$$

$$r = R_2 : \quad T_2 = T_3, \quad \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r} = \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r}, \quad \frac{w_2}{\rho_2} = \frac{w_3}{\rho_3}; \quad (9)$$

$$r = R_3 : \quad \frac{\partial T_3}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial w_3}{\partial r} = 0. \quad (10)$$

Здесь r — координата; ρ — плотность вещества (функция температуры); c_p — изобарная теплоемкость (функция температуры); λ — коэффициент теплопроводности (функция температуры); T — температура; w — массовая скорость вещества ($w = \rho v$); p — давление среды; R_μ — универсальная газовая постоянная; μ — молекулярная масса вещества (кг/кмоль); E_1 и E_2 — модули упругости; η_1 и η_2 — коэффициенты Пуассона; h_2 — толщина оксидной оболочки;

α_{T_1} и α_{T_2} — коэффициенты расширения; Π_i — коэффициент, который вычисляется следующим образом: $\Pi_i = \partial \rho_i / \partial T_i$; индекс 0 относится к начальному значению параметра.

Систему уравнений (1)–(10) дополняли базой данных теплофизических свойств веществ и интегрировали численно с использованием неконсервативной неявной разностной схемы и подвижной адаптивной расчетной сетки. Процедура расчета включала последовательные приближения на каждом шаге по времени. Точность решения непрерывно проверяли по соблюдению массового баланса ядра частицы, оксидной оболочки и газовой фазы. Нарушение массового баланса не превышало 1% при нагреве частицы до температуры плавления алюминия (933 К) при начальной температуре газа до 2064 К.

Модель (1)–(10) применили для оценки влияния толщины оксидного слоя на время прогрева частицы диаметром $d_0 = 2R_2 = 6$ мкм, помещенной в газообразный кислород с различной начальной температурой. Считали, что в исходный момент времени кислород вокруг частицы однородно прогрет до температуры T_{30} (индекс 0 относится к начальным уровням), а начальная температура ядра частицы и ее оксидной оболочки равна 293 К. Радиус расчетной области R_3 вокруг частицы принимали достаточно большим по сравнению с начальным радиусом частицы R_2 , так что в процессе прогрева физические параметры на границе расчетной области не изменялись. Момент времени, когда оксидный слой теряет свои защитные свойства в результате растрескивания, определяли по следующему условию:

$$\sigma_2 \approx \sigma_{cr}. \quad (11)$$

В (11) критическое значение напряжения σ_{cr} вычисляли по известному уравнению [4]:

$$\sigma_{cr} = \frac{K_c(T)}{\sqrt{\pi \delta_{cr}}}, \quad (12)$$

где $K_c(T) = a_0 + a_1 T$ — коэффициент трещиностойчивости ($a_0 = 8,831 \cdot 10^{-5}$ Па·м^{1/2}, $a_1 = 187,662$ Па·м^{1/2}/К — по данным [4]); T — температура в градусах Кельвина; δ_{cr} — характерный размер

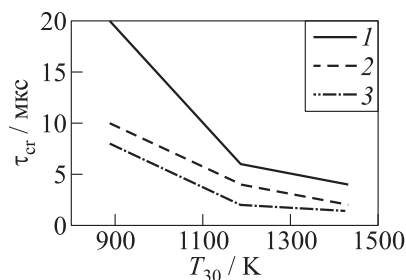


Рис. 2 Время прогрева двухслойной частицы ($d_0 = 6$ мкм) до достижения критического напряжения в оксидной оболочке в зависимости от начальной температуры газа и начальной толщины оксидного слоя: 1 — $h_{20} = 0,15$ мкм; 2 — $0,45$ мкм; 3 — $h_{20} = 0,9$ мкм

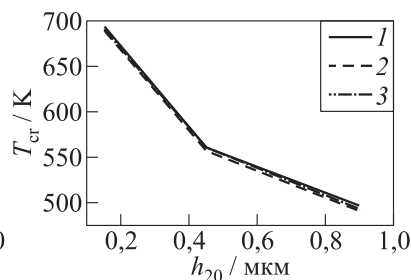


Рис. 3 Расчетная температура «растрескивания» оксидной оболочки двухслойной частицы ($d_0 = 6$ мкм) в зависимости от начальной температуры газа и начальной толщины оксидного слоя: 1 — $T_{30} = 975$ К; 2 — 1573 ; 3 — $T_{30} = 2064$ К

микротрещин в оксидной оболочке, m (принимался равным $1/8$ толщины оксидного слоя [4]).

На рис. 2 представлены результаты расчетов, в ходе которых были определены моменты времени, когда для частицы в оксидной оболочке с различной исходной толщиной оксидного слоя, помещенной в кислород с начальной температурой 975, 1573 и 2064 К при атмосферном давлении, достигаются критические напряжения σ_{cr} . Из рис. 2 видно, что увеличение начальной толщины оксидной оболочки приводит к уменьшению времени прогрева частицы до критической температуры T_{cr} (температура в точке R_1 (см. рис. 1) на границе «ядро частицы–оксидный слой»), при которой выполняется условие (11) и, следовательно, возможно растрескивание оболочки. Так, для частицы с $d_0 = 6$ мкм и $h_{20} = 0,15$ мкм это время составляет 20 мкс, в то время как частица, покрытая слоем оксида $h_{20} = 0,9$ мкм, прогреется до критической температуры значительно быстрее — за 4 мкс (см. рис. 2).

Этот эффект связан с уменьшением критической температуры T_{cr} (температуры «растрескивания») для частиц с большей толщиной оксидного слоя (рис. 3). Последнее объясняется ослабляющим

влиянием глубоких микротрещин на $\sigma_{ст}$ (см. уравнение (12)), тогда как толщина оболочки незначительно влияет на скорость нагрева металлического ядра.

Наиболее интересен тот факт, что для мелкодисперсных частиц алюминия ($d_0 = 6$ мкм), покрытых тонкими оксидными пленками ($h_{20} < 0,15$ мкм), расчетная температура «растрескивания» (693 К, см. рис. 3) оксидной оболочки оказалась близкой к минимальной температуре воспламенения частицы диаметром 6 мкм (689 К по экспериментальным данным [1]). Исходя из этого, можно предположить, что причина низкотемпературного воспламенения мелкодисперсных частиц алюминия — нарушение целостности оксидной оболочки, вызванное ее механическим разрушением вследствие существенного различия (в 2–3 раза) значений коэффициентов термического расширения алюминия и его оксида.

Таким образом, в работе предложена модель прогрева двухслойной частицы металла, дополненная условием образования трещин. Применение модели к частицам алюминия диаметром 6 мкм, покрытым оксидной оболочкой разной толщины, позволило установить, что увеличение толщины оксидной оболочки приводит к уменьшению температуры ее «растрескивания» и частицы с толстой оксидной оболочкой быстрее прогреваются до момента, когда оксидная оболочка теряет защитные свойства.

В дальнейшем разработанную математическую модель планируется модифицировать для учета влияния других факторов (диффузия окислителя через оксидную оболочку, плавление и испарение металлического ядра частицы и ее оксидной оболочки, кристаллизация оболочки) на воспламенение мелкодисперсных частиц.

Работа выполнена по Государственному контракту № 019-600.2009 «Разработка технологий изготовления пульсирующих реактивных детонационных микродвигателей на жидких топливах с добавками наночастиц высокоэнергетических компонент для универсальной системы стабилизации космических аппаратов» в рамках Научно-технической программы Союзного государства «Разработка нанотехнологий создания материалов, устройств и систем космической техники и их адаптация к другим отраслям техники и массовому производству» на 2009–2012 годы («Нанотехнология-СТ»).

Литература

1. Гуревич М. А., Озеров Е. С., Юринов А. А. О влиянии пленки окисла на характеристики воспламенения алюминия // ФГВ, 1978. № 4. С. 50–55.
2. Великанова В. Л., Золотко А. Н., Копейка К. М., Полецук Д. И. Критические условия воспламенения взвеси частиц алюминия // Физика аэродисперсных систем, 1978. Вып. 17. С. 54–58.
3. Тао, Н. 2002. Shock wave ignition of aluminum particles. *J. Phys. (France)* 12:105–12.
4. Rosenband, V. 2004. Thermo-mechanical aspects of the heterogeneous ignition of metal. *Combust. Flame* 137:366–75.
5. Глассман И., Меллор А. М., Салливан Х. Ф., Лорендео Н. М. Обзор моделей воспламенения и горения металлов. Принстонский университет, США, 1971.
6. Федоров А. В., Харламова Ю. В. Воспламенение частицы алюминия // ФГВ, 2003. № 5. С. 65–68.
7. Бекстед М. В., Лианг У., Паддупаккам К. В. Математическое моделирование горения одиночной алюминиевой частицы (обзор) // ФГВ, 2005. № 6. С. 15–33.
8. Тимошенко С. П., Гудьер Дж. Теория упругости. — М.: Наука, 1975. 576 с.