

## ФИЛЬТРАЦИОННОЕ ГОРЕНИЕ В ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ СВС-РЕАКТОРА

УДК 536.46+662.421

В. В. Грачев, Т. П. Ивлева

Институт структурной макрокинетики РАН, 142432 Черногловка

*Предлагается двумерная математическая модель фильтрационного горения слоя шихты в СВС-реакторе, в которой учитывается изменение температуры и давления газа в реакторе в ходе синтеза. Для кинетического режима горения построено приближенное аналитическое решение, которое удовлетворительно согласуется с результатами численного расчета. Показано, что прогрев газа в объеме реактора может приводить к ускорению распространения фронта реакции, а момент достижения максимального давления в реакторе (по которому на практике судят об окончании синтеза) может не совпадать с окончанием горения.*

### ВВЕДЕНИЕ

Методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) получают много ценных соединений при горении смеси неорганических порошков в атмосфере азота [1, 2]. Отличительной особенностью данного процесса, получившего название фильтрационного горения, является фильтрация азота по порам шихты к зоне реакции. В обзорах [3, 4] подведены итоги пятнадцатилетнего периода развития теории фильтрационного горения, заложившего фундамент для дальнейших работ. Почти все задачи, рассмотренные на этом этапе, решались в одномерной постановке. Вследствие этого в них анализировались лишь два случая: направление потока газа к зоне реакции противоположно направлению распространения фронта горения (встречная фильтрация); оба направления совпадают (спутная фильтрация). В практике СВС наиболее распространен случай фильтрации газа через боковую поверхность горящего образца, когда поток газа перпендикулярен направлению распространения фронта (поперечная фильтрация). Учет этого обстоятельства диктует двумерную постановку задачи, которая впервые была осуществлена в [5], а затем в [6] и [7]. В [8] предложена модель, описывающая поперечную фильтрацию в рамках одномерной постановки задачи.

До сих пор во всех теоретических работах давление и температура газа в объеме, из которого происходит фильтрация газа к зоне реакции, считались постоянными. Это неплохое приближение для условий горения малых образцов в бомбе постоянного давления, но оно никак не отражает ситуацию, имеющую место в СВС-реакторе, в котором сжигают сразу несколько килограммов шихты под давлением азота в несколько десятков атмосфер [9]. В ходе синтеза газ в объеме нагревается на сотни градусов, а давление в реакторе существенно изменяется. О завершении синтеза судят, как правило, по моменту достижения максимального давления. Изменение давления и температуры газа вне ших-



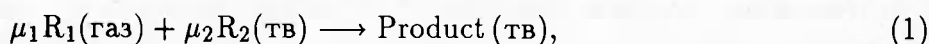
Рис. 1. Схематическое изображение разреза СВС-реактора и схема расчетной области

ты, в свою очередь, оказывает влияние на процесс горения и в конечном итоге на качество получаемого продукта. Понимание закономерностей изменения давления и температуры газа в реакторе дает ключ к управлению ходом синтеза.

В данной работе предлагается двумерная математическая модель фильтрационного горения в СВС-реакторе, в которой впервые учитывается изменение давления и температуры газа в объеме реактора в ходе синтеза. При анализе модели используются приближенное аналитическое и численное решения исходной системы уравнений. Полученные результаты затем сравниваются.

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Реальный СВС-реактор представляет собой цилиндрический сосуд с охлаждаемыми стенками. Пусть слой шихты (смесь порошков твердого реагента и разбавителя) длиной  $L$ , высотой  $2h$  и шириной  $2W$  расположен в центре реактора (радиуса  $r$ ), заполненного газом до начального давления  $p_0$  (рис. 1). Зажигание шихты осуществляется на левом торце засыпки ( $x = 0$ ) кратковременным тепловым импульсом, который инициирует распространение волны горения по направлению оси  $Ox$  за счет тепла, выделяющегося при экзотермической реакции газ — твердое с образованием твердого продукта



где  $\mu_1$  и  $\mu_2$  — стехиометрические коэффициенты.

Для описания процессов тепло- и массопереноса, происходящих в шихте при фильтрационном горении, используется традиционная система уравнений [4] (приведем ее сразу в безразмерном виде и с учетом двумерности):

$$\frac{\partial[(1 + c\rho + \mu c\eta + c_u)\Theta]}{\partial\tau} = \frac{\partial^2\Theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\Theta}{\partial Y^2} - \frac{\partial(cV_x\rho\Theta)}{\partial X} - \frac{\partial(cV_y\rho\Theta)}{\partial Y} + \frac{c_\mu}{\gamma} \frac{\partial\eta}{\partial\tau}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial\rho}{\partial\tau} + \frac{\partial(\rho V_x)}{\partial X} + \frac{\partial(\rho V_y)}{\partial Y} = -\mu \frac{\partial\eta}{\partial\tau}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial\eta}{\partial\tau} = \begin{cases} \gamma f(\eta)g(P) \exp(\Theta/(1 + \beta\Theta)), & \eta < 1, \\ 0, & \eta \geq 1, \end{cases} \quad (4)$$

$$V_x = -K_f \frac{\partial P}{\partial X}, \quad V_y = -K_f \frac{\partial P}{\partial Y}, \quad (5)$$

$$P = \frac{\rho(1 + \beta\Theta)}{\rho_0(1 + \beta\Theta_0)}, \quad (6)$$

где

$$c = \frac{c_g}{c_s}, \quad \mu = \frac{\mu_1 M_g}{\mu_2 M_s}, \quad \rho = \frac{\rho_g}{\rho_{s,0}}, \quad c_d = \frac{(1 + \mu c) \rho_d}{(1 + \mu) \rho_{s,0}}, \quad F = \frac{p}{p_0}, \quad \eta = 1 - \frac{\rho_s}{\rho_{s,0}},$$

$$c_\mu = 1 + \mu c + c_d, \quad T_* = T_0 + \frac{Q}{c_s c_\mu}, \quad \tau = \frac{t}{t_*}, \quad a = \frac{\lambda}{c_s \rho_{s,0}}, \quad K_f = \frac{k_F p_0}{a}, \quad x_* = \sqrt{t_* a},$$

$$\Theta = \frac{T - T_*}{RT_*^2} E, \quad \gamma = \frac{RT_*^2}{E(T_* - T_0)}, \quad \beta = \frac{RT_*}{E}, \quad i_* = \frac{\gamma}{k_0} \exp \frac{E}{RT_*}, \quad X = \frac{x}{x_*}, \quad Y = \frac{y}{y_*}.$$

Здесь  $\rho_g, \rho_s, \rho_d$  — массы газа, твердого реагента и разбавителя в единице объема шихты;  $c_g, c_s, c_d$  — теплоемкости газа, твердого реагента и разбавителя;  $x, y$  — пространственные координаты;  $M_g, M_s$  — молекулярные массы соответствующих реагентов;  $T$  — температура шихты (среда предполагается гомогенной в тепловом отношении);  $t$  — время;  $k_0$  — предэкспоненциальный множитель;  $\eta$  — глубина превращения;  $E$  — энергия активации;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $Q$  — теплота реакции;  $p$  — давление;  $k_F$  — коэффициент фильтрации;  $V_x, V_y$  — компоненты скорости фильтрации газа вдоль осей  $Ox, Oy$ ;  $a, \lambda$  — эффективные температуропроводность и теплопроводность шихты;  $f(\eta), g(P)$  — функции, учитывающие зависимость скорости реакции от глубины превращения и давления соответственно; индексом 0 обозначены начальные значения величин, звездочкой — соответствующие характерные величины.

Чтобы упростить анализ модели, распределения температуры, плотности и глубины превращения предполагают симметричными относительно плоскости  $y = 0$  и однородными вдоль оси  $Oz$ , т. е. они являются функциями только пространственных координат  $x$  и  $y$ . Основной тепло- и массообмен шихта — газ происходит на поверхностях  $y = \pm h$  (см. рис. 1). Потоками тепла и массы на границе  $z = W$  пренебрегаем, считая слой шихты достаточно тонким ( $h \ll W \approx r$ , где  $r$  — радиус реактора).

С учетом сделанных допущений граничные условия для уравнений (2), (3) и (5), отражающие условия иницирования горения и тепло- и массообмена шихты с газом в объеме реактора и со стенками реактора, можно записать следующим образом:

$$x = 0: \quad \Theta = \Theta_i \quad (0 < \tau \leq \tau_i), \quad \frac{\partial \Theta}{\partial X} = b(\Theta - \Theta_0) \quad (\tau > \tau_i), \quad \frac{\partial P}{\partial X} = 0,$$

$$x = L: \quad -\frac{\partial \Theta}{\partial X} = b(\Theta - \Theta_0), \quad \frac{\partial P}{\partial X} = 0,$$

$$y = 0: \quad \frac{\partial \Theta}{\partial Y} = \hat{v}, \quad \frac{\partial P}{\partial Y} = \hat{v},$$

$$y = h: \quad -\frac{\partial \Theta}{\partial Y} + c_p V_y (\Theta - \Theta_G) = B(\Theta - \Theta_G), \quad P = P_G,$$
(7)

где  $\Theta_i$  — температура иницирования горения;  $\tau_i$  — время действия теплового импульса;  $b, B$  — безразмерные коэффициенты теплообмена шихта — стенка реактора и шихта — газ соответственно;  $\Theta_0$  — температура стенок реактора (предполагается постоянной в ходе всего процесса и равной начальной температуре шихты);  $\Theta_G, P_G$  — температура и давление газа в объеме реактора.

Ранее во всех работах предполагалось  $\Theta_G, P_G = \text{const}$ . При горении в СВС-реакторах эти величины существенно меняются. Измерения температуры азота в ходе синтеза нитрида кремния показали, что в один и тот же момент времени различие температур в

разных точках вне шихты незначительно [10]. В простейшем случае можно пренебречь распределением температуры газа и характеризовать его состояние средней по объему температурой, меняющейся во времени. Тогда изменение температуры, плотности и давления газа описываются уравнениями баланса тепла, массы и уравнением состояния:

$$c\rho_G V_G \frac{d\Theta_G}{d\tau} = BW \int_0^L [\Theta(x, h) - \Theta_G] dx - bS(\Theta_G - \Theta_0), \quad (8)$$

$$\rho_G V_G + W \int_0^L \int_0^h (\rho + \mu\eta) dy dx = \rho_{G,0} V_G + \rho_0 W h L, \quad (9)$$

$$P_G = \frac{\rho_G(1 + \beta\Theta_G)}{\rho_{G,0}(1 + \beta\Theta_0)}, \quad (10)$$

где  $\rho_G$  — плотность газа вне шихты;  $2V_G$  — объем газа вне шихты;  $2S$  — площадь поверхности теплоотдачи через стенки реактора.

Начальные условия предполагают равномерное распределение температуры и давления во всем объеме реактора:

$$\tau = 0: \quad \Theta = \Theta_G = \Theta_0 \equiv -\frac{1}{\gamma}, \quad P_i = P_G = 1, \quad \eta = 0. \quad (11)$$

Уравнения (2)–(11) представляют собой замкнутую систему, решение которой позволяет для слоя шихты заданных состава и размера при данных начальных температуре и давлении в реакторе определить характеристики процесса горения и изменение температуры газа и давления в реакторе в ходе синтеза.

Уравнения (2)–(11) описывают также горение слоя шихты, расположенного на теплоизоляционной подложке на дне прямоугольного закрытого контейнера (см. рис. 1). Случай, когда контейнер открытый, температура и давление газа вне шихты постоянны и имеется теплоотвод в подложку, рассматривался в [6].

## ПРИБЛИЖЕННОЕ АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Приведем решение для практически важного предельного случая хорошей газопроницаемости шихты, когда фильтрационных затруднений нет (кинетический режим) и в волне горения достигается полная глубина превращения ( $\eta = 1$ ). Решение строится в квазистационарном приближении в три этапа. На первом решаются уравнения для шихты (2)–(6) и после осреднения по  $y$  традиционными методами теории горения [11] определяются температура горения, скорость горения и профиль температуры. При этом температура газа и давление в реакторе, которые входят в граничные условия (7), полагаются постоянными. На втором этапе найденное решение для шихты подставляется в уравнения для газа (8)–(10), которые решаются в предположении постоянства скорости горения. На третьем этапе полученная зависимость температуры газа от времени подставляется в решение, полученное на первом этапе для шихты, что позволяет определить изменение максимальной температуры во фронте  $\Theta_{\max}$  и скорости горения  $\omega$  в ходе синтеза. Следуя вышеизложенной схеме, найдем приближенное решение задачи.

Первый этап.  $\Theta_G = \text{const}$ ;  $P_G = \text{const}$ . После инициирования формируется фронт горения, который распространяется по шихте со скоростью  $\omega$ . Пренебрегая концевыми

эффектами вдоль оси  $Ox$ , найдем решение для стационарной волны горения. Для этого осредним уравнения (2)–(4) по  $Y$  и перейдем в систему координат, связанную с волной горения ( $\xi = X - \omega\tau$ ):

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} + \omega(1 + c\rho_0 + c_d) \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} - \frac{d}{d\xi} \left[ \frac{c}{h} (\Theta - \Theta_G) \int_{\xi}^{\infty} (\rho V_y)_h d\xi \right] - \frac{\omega c_\mu}{\gamma} \frac{d\eta}{d\xi} - \frac{B}{h} (\Theta - \Theta_G) = 0, \quad (12)$$

$$-\omega \frac{d(\rho + \mu\eta)}{d\xi} + \frac{d(\rho V_x)}{d\xi} + \frac{1}{h} (\rho V_y)_h = 0, \quad (13)$$

$$-\omega \frac{d\eta}{d\xi} = \gamma f(\eta) g(P) \exp \frac{\Theta}{1 + \beta\Theta}. \quad (14)$$

Для средних величин в (12)–(14) использованы прежние обозначения: например, под  $\Theta$  понимается средняя по толщине слоя шихты температура  $(1/h) \int_0^h \Theta dy$ .

Рассмотрим сначала случай  $B = 0$  (теплообмен шихта — газ несуществен). Из первых интегралов уравнений (12), (13) найдем соотношение для температуры горения:

$$\Theta_b = -\frac{1}{\gamma} \frac{c\rho_b}{c_b}, \quad c_b = c_\mu + c\rho_b, \quad (15)$$

где  $\rho_b$  — плотность газа в порах продукта за фронтом горения. Поскольку предполагается хорошая газопроницаемость шихты, давление в порах равно давлению в реакторе  $P = P_G = 1$ . Тогда из уравнения состояния (6) имеем

$$\rho_b = \rho_0 \frac{1 + \beta\Theta_c}{1 + \beta\Theta_b}. \quad (16)$$

Подставляя (16) в (15), получаем уравнение для определения температуры горения  $\Theta_b$ . При давлении в несколько десятков атмосфер  $c\rho_b \ll c_\mu$  и, следовательно,  $\Theta_b \approx 0$ . Для определения скорости горения предположим, что основная масса газа поставляется в зону реакции через непрореагировавшую часть шихты. Для простоты примем первый порядок реакции по глубине превращения ( $f(\eta) = 1 - \eta$ ) и нулевой по давлению:  $g(P) = 1$  при  $P > 0$  и  $g(P) = 0$  при  $P = 0$ . Тогда в приближении узкой зоны реакции [11] для скорости горения получаем выражение:

$$\omega_0 = \frac{\gamma}{\sqrt{c_\mu}} \exp \frac{\Theta_b}{2(1 + \beta\Theta_b)}. \quad (17)$$

Перейдем к рассмотрению случая  $B \neq 0$ , соответствующего распространению волны горения при наличии теплопотерь. В соответствии с идеей Я. Б. Зельдовича [11] зависимость скорости горения от максимальной температуры во фронте  $\omega = \omega(\Theta_{\max})$  имеет такой же вид, как и при отсутствии теплопотерь:

$$\omega = \frac{\gamma}{\sqrt{c_\mu}} \exp \frac{\Theta_{\max}}{2(1 + \beta\Theta_{\max})}. \quad (18)$$

Дополнительная связь между  $\Theta_{\max}$  и  $\omega$  находится из условия сшивки в зоне реакции решений для зоны прогрева и зоны продуктов (далее для большей наглядности формулы приводятся для случая малых теплопотерь, точнее  $B/h\omega^2 c_b^2 \ll 1$ ; это не меняет сути, но

освобождает текст от громоздких формул):

$$\Theta_{\max} = \Theta_G + \frac{c_\mu}{\gamma c_b} \left(1 + \frac{B}{h\omega^2 c_b^2}\right)^{-1}. \quad (19)$$

В классической задаче о распространении волны горения при наличии теплопотерь [11] уравнения (18), (19) служат для определения двух неизвестных величин  $\omega$  и  $\Theta_{\max}$ . В данном случае имеется третья неизвестная величина  $\Theta_G$ , для определения которой требуется знание профиля температуры в зоне продуктов:

$$\Theta = \Theta_G + (\Theta_{\max} - \Theta_G) \exp \frac{B\xi}{h\omega c_b}. \quad (20)$$

**Второй этап.**  $\omega = \text{const}$ . Перейдем к решению уравнений для газа (8), (9). Пренебрегая массой газа в порах по сравнению с массой газа вне шихты и аппроксимируя профиль глубины превращения «ступенькой» ( $\eta = 1$  в зоне продуктов и  $\eta = 0$  перед фронтом), из (9) определяем изменение плотности газа в объеме реактора в ходе синтеза:

$$\rho_G = \rho_{G,0} - \mu \frac{Wh}{V_G} \omega \tau. \quad (21)$$

Основной вклад в интеграл, стоящий в правой части (8), вносит тепловой поток от продуктов реакции. Уравнение для температуры газа (8) после подстановки в него (19)–(21) и выполнения интегрирования принимает вид

$$(\Delta - \tau) \frac{d\Theta_G}{d\tau} = \psi(1 - e^{-\sigma\tau}) - \nu \left(\Theta_G + \frac{1}{\gamma}\right), \quad (22)$$

где

$$\Delta = \delta \frac{L}{\omega}, \quad \delta = \frac{\rho_{G,0} V_G}{\mu W h L}, \quad \psi = \frac{c_\mu}{\gamma \mu c} \left(1 + \frac{B}{h\omega^2 c_b^2}\right)^{-1}, \quad \sigma = \frac{B}{h c_b}, \quad \nu = \frac{bS}{W h c \omega \mu}.$$

Решением (22) является выражение

$$\Theta_G = -\frac{1}{\gamma} + \psi(\Delta - \tau)^\nu \int_0^\tau \frac{1 - e^{-\sigma\tau}}{(\Delta - \tau)^{\nu+1}} d\tau. \quad (23)$$

Интеграл в (23) не выражается через элементарные функции. В качестве неплохого приближения при  $\delta \gg 1$ , физически означающего, что масса газа в реакторе много больше массы газа, потребляемой в ходе синтеза, можно предложить следующую формулу:

$$\Theta_G = -\frac{1}{\gamma} + \frac{\psi}{\nu} (1 - e^{-\sigma\tau}) + \frac{\psi\sigma}{\nu} (e^{-\sigma\tau} - e^{-(\nu/\Delta)\tau}) \left(\frac{\nu}{\Delta} - \sigma\right)^{-1}. \quad (24)$$

**Третий этап.** Уравнения (18), (19) и (24) образуют систему для определения трех неизвестных величин: скорости волны горения  $\omega$ , максимальной температуры во фронте горения  $\Theta_{\max}$  и температуры газа в объеме реактора  $\Theta_G$ . Для получения явного решения задачи в уравнениях (19) и (24) заменим скорость  $\omega$  (которая входит в параметры  $\Delta$ ,  $\psi$ ,  $\nu$ ) величиной  $\omega_0$ , определяемой из (17). Подставляя полученные зависимости от времени  $\Theta_G(\tau)$  и  $\Theta_{\max}(\tau)$  в (18), находим изменение во времени скорости распространения фронта горения  $\omega(\tau)$ . Подстановка  $\omega(\tau)$  в (21) дает зависимость  $\rho_G(\tau)$ . Зная температуру  $\Theta_G(\tau)$  и плотность газа  $\rho_G(\tau)$ , из (10) получаем изменение давления в реакторе в ходе синтеза  $P_G(\tau)$ .

Найденное решение справедливо на стадии распространения волны горения по шихте, т. е. при  $\tau < \tau_b$ , где  $\tau_b$  — время сгорания шихты, определяемое из уравнения

$$L = \int_0^{\tau_b} \omega d\tau. \quad (25)$$

На стадии остывания ( $\tau > \tau_b$ ) газ больше не потребляется, и его плотность постоянна:

$$\rho_G = \rho_{G,0} \left(1 - \frac{\tau_b}{\Delta}\right) = \text{const}, \quad (26)$$

а изменение температуры газа описывается следующей формулой:

$$\Theta_G = -\frac{1}{\gamma} + \left[\Theta_G(\tau_b) + \frac{1}{\gamma}\right] \exp\left(-\frac{\tau - \tau_b}{\Delta - \tau_b}\right) + \frac{\psi(1 - e^{-\sigma\tau_b})}{\nu - \sigma(\Delta - \tau_b)} \left[e^{-(\tau - \tau_b)\sigma} - e^{-\frac{\tau - \tau_b}{\Delta - \tau_b}\nu}\right]. \quad (27)$$

### ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Решение системы (2)–(11) проводилось с использованием перекрестной прогонки на переменной, подвижной, адаптирующейся к решению пространственной сетке. В ходе численного «эксперимента» через заданные интервалы времени на экран дисплея выводились изолинии  $\eta = 0,5$  (по которым можно судить о форме и местоположении фронта горения), распределения температуры  $\Theta(X)$  и глубины превращения  $\eta(X)$  в центре ( $Y = 0$ ) и на поверхности шихты ( $Y = h$ ). Была предусмотрена возможность вывода на экран изменяющихся во времени аксонометрических проекций распределений  $\Theta(X, Y)$  (рис. 2),  $\eta(X, Y)$  и  $P(X, Y)$ . Также можно было наблюдать за изменениями температуры, давления и плотности газа вне шихты, рассчитанными по исходной системе уравнений (сплошные линии на рис. 3) и по формулам (10), (18), (21), (23), (26), (27) приближенного аналитического решения (штриховые линии на рис. 3).

Счет проводился для реакции первого порядка по глубине превращения и нулевого порядка по давлению. Безразмерные параметры теории горения  $\gamma$  и  $\beta$  выбирались из области, определяющей устойчивость стационарного распространения фронта горения при  $\Theta_G = \text{const}$ ,  $P_G = \text{const}$ . Коэффициент фильтрации полагался достаточно большим ( $K_f \approx 10^3 \gg 1$ ), чтобы газ мог фильтроваться без затруднений и чтобы реализовался кинетический режим горения.

Такой выбор параметров позволяет провести сравнение результатов численного сче-

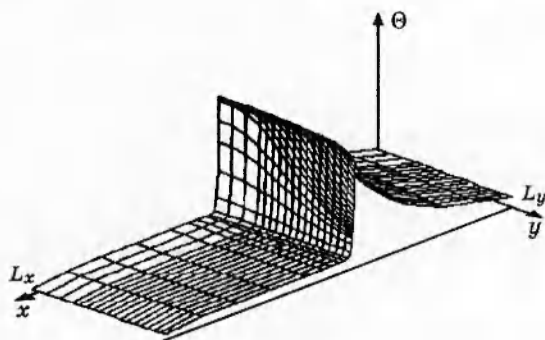


Рис. 2. Аксонометрическая проекция поля температуры

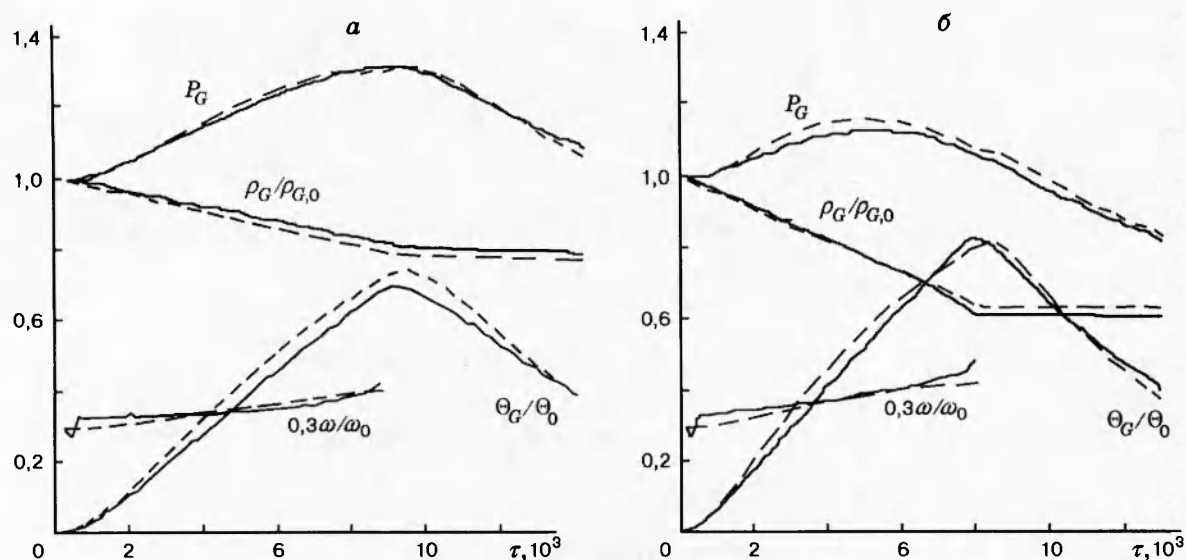


Рис. 3. Изменение давления, плотности, температуры газа в объеме реактора в ходе синтеза и скорости распространения фронта горения по шихте:

*a* —  $\delta = 4,52$ ,  $\tau_{\max} > \tau_b$ ; *b* —  $\delta = 2,26$ ,  $\tau_{\max} < \tau_b$

та и приближенного аналитического решения. Конкретные значения параметров для рис. 3, *a, b* следующие:  $\beta = 0,14$ ,  $\gamma = 0,168$ ,  $B = 0,01$ ,  $b = 0,15$ ,  $c = c_2 = 1$ ,  $\mu = 0,67$ ,  $L = 1000$ ,  $h = 20$ ,  $r = 200$ .

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 2 хорошо видно, что теплопотери несколько снижают температуру на поверхности шихты, но искривление фронта реакции незначительно, что служит основанием для осреднения по  $y$  при построении приближенного аналитического решения.

После начала горения поток тепла от сгоревшего слоя шихты разогревает газ в объеме реактора. В каждый следующий момент времени во фронт реакции поступает все более и более прогретый газ, поэтому максимальная температура в волне горения растет и соответственно растет скорость фронта, т. е. распространение волны горения происходит с ускорением. Рост температуры газа вызывает рост давления в реакторе. Конкурирующим фактором, действующим в сторону снижения давления, является падение плотности газа в объеме из-за наличия потока газа в шихту, вызванного его потреблением в ходе синтеза. О моменте окончания процесса горения  $\tau_b$  можно судить по излому на графиках плотности, когда прекращается потребление газа.

Важным показателем для технологов является момент достижения максимального давления в реакторе ( $\tau_{\max}$ ). В зависимости от начальных условий и условий теплообмена возможны два случая:

$\tau_{\max} > \tau_b$  (см. рис. 3, *a*), максимальное давление в реакторе достигается после окончания процесса горения;

$\tau_{\max} < \tau_b$  (см. рис. 3, *b*), максимальное давление в реакторе достигается ранее, чем в волне горения успевает прореагировать все исходное вещество.

Значение  $\tau_{\max}$  определяется как больший корень уравнения  $\partial P_G / \partial \tau = 0$ . Для случая,



когда время тепловой релаксации газа много меньше времени тепловой релаксации слоя продукта ( $\Delta/\nu \ll 1/\sigma$ ), можно предложить приближенное значение корня:

$$\tau_{\max} \approx \frac{1}{\sigma} \ln \left[ \frac{1 + \sigma \Delta}{1 + (\nu/\psi)(1/\beta - 1/\gamma)} \right]. \quad (28)$$

Значение  $\tau_{\max}$ , рассчитанное по формуле (28) для условий рис. 3,б, равно 4883, а численный счет дает  $\tau_{\max} = 5232$ . Эффект достижения максимального давления ранее окончания горения на рис. 3,б получен за счет снижения начального давления в реакторе по сравнению с рис. 3,а. Важной величиной в этом случае является параметр  $\delta$ , который представляет собой отношение массы газа в реакторе перед началом синтеза к массе газа, необходимой для полного превращения шихты в конечный продукт. Для рис. 3,а  $\delta = 4,52$  (при выбранных значениях других параметров такому значению  $\delta$  для системы кремний — азот при  $T_0 = 300$  К отвечает начальное давление  $p_0 = 15$  МПа), для рис. 3,б  $\delta = 2,26$  (соответственно  $p_0 = 7,5$  МПа). Этот же эффект может быть получен и другими путями, важно только, чтобы выполнялось условие  $\tau_{\max} < \tau_b$ .

## ВЫВОДЫ

Предложена математическая модель фильтрационного горения слоя шихты в СВС-реакторе с учетом изменения температуры и давления газа в реакторе в ходе синтеза.

Для кинетического режима горения построено приближенное аналитическое решение, которое удовлетворительно согласуется с результатами численного счета исходной системы уравнений.

Показано, что прогрев газа в объеме реактора может приводить к ускорению распространения фронта реакции, т. е. условия синтеза по мере продвижения волны реакции постоянно меняются. Отсюда, как следствие, возможна неоднородность свойств получаемого продукта.

Момент достижения максимального давления в реакторе (по которому на практике судят об окончании синтеза) может не совпадать с окончанием горения.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (код проекта 94-03-09673) и Международным фондом Сороса (грант ISF NL 7000).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Мержанов А. Г., Боровинская И. П. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез тугоплавких неорганических соединений // Докл. АН СССР. 1972. Т. 204, № 2. С. 366–369.
2. Мержанов А. Г., Боровинская И. П., Володин Ю. Е. О механизме горения пористых металлических образцов в азоте // Докл. АН СССР. 1972. Т. 206, № 4. С. 905–908.
3. Алдушин А. П., Мержанов А. Г. Теория фильтрационного горения: общие представления и состояние исследований // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука, 1988. С. 9–52.
4. Алдушин А. П. Фильтрационное горение металлов // Там же. С. 52–71.
5. Ивлева Т. П., Мержанов А. Г., Шкадинский К. Г. Поверхностное горение пористых конденсированных веществ с конденсированными продуктами // Химиче-

- ская физика процессов горения и взрыва. Горение конденсированных и гетерогенных систем: Материалы VI Всесоюз. симпоз. по горению и взрыву. Черногловка, 1980. С. 99–103.
6. Dandekar H. W., Puszynski J. A., Hlavacek V. Two-dimensional numerical study of cross-flow filtration combustion // *AIChE J.* 1990. V. 36, N 11. P. 1649–1660.
  7. Боровинская И. П., Ивлева Т. П., Лорян В. Э., Шкадинский К. Г. Естественное изменение пористости реагирующего спрессованного вещества и неоднородные режимы фильтрационного горения // *Физика горения и взрыва.* 1995. Т. 31, № 2. С. 47–57.
  8. Shkadinsky K. G., Shkadinskaya G. V., Matkowsky B. J., Volpert V. A. Combustion synthesis of a porous layer // *Combust. Sci. Technol.* 1992. V. 88. P. 247–270.
  9. Прокудина В. К., Шестакова Т. В., Боровинская И. П. и др. Получение нитрида алюминия марки СВС и высокоплотной керамики на его основе // *Проблемы технологического горения.* Черногловка, 1981. Т. 2. С. 5–8.
  10. Grachev V. V., Shatalov B. N., Zakorzhevskii V. V., et al. Regularities of silicon combustion in nitrogen in SHS reactors // *3rd Intern. Symp. on SHS: Abstracts.* Wuhan, China, 1995. P. 123.
  11. **Математическая** теория горения и взрыва / Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблатт, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе. М.: Наука, 1980.

*Поступила в редакцию 21/II 1996 г.*

---