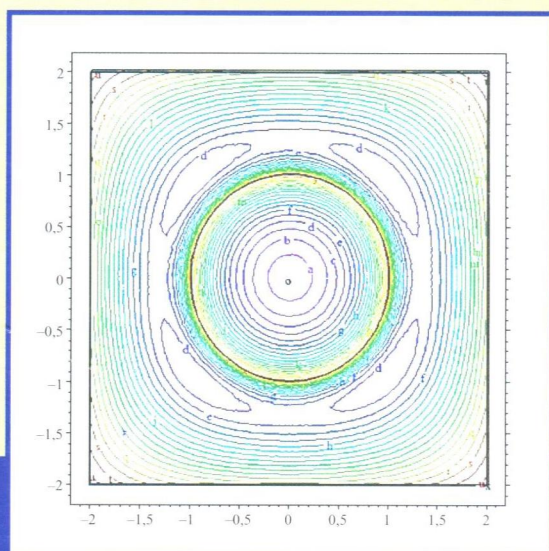


**А. В. ФЁДОРОВ, А. В. ШУЛЬГИН**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ  
И ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ  
В МИКРО- И НАНОЧАСТИЦАХ  
МЕТАЛЛОВ**



**НОВОСИБИРСК  
2017**

Министерство образования и науки Российской Федерации  
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

---

А.В. ФЁДОРОВ, А.В. ШУЛЬГИН

МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ  
ПРЕВРАЩЕНИЙ В МИКРО-  
И НАНОЧАСТИЦАХ  
МЕТАЛЛОВ

Монография

НОВОСИБИРСК  
2017

УДК 621.365.91:544.654.2  
Ф 333

Рецензенты:

д-р физ.-мат. наук, проф., зав. лаб. ИТПМ СО РАН *О.Б. Ковалев*  
д-р техн. наук, проф., зав. лаб. ИГиЛ СО РАН *И.В. Яковлев*

**Фёдоров А.В.**

Ф 333 Моделирование физических и химических превращений в микро- и наночастицах металлов: монография / А.В. Фёдоров, А.В. Шульгин. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2017. – 268 с.

ISBN 978-5-7782-3290-7

Издание посвящено проблемам физического и математического моделирования динамических процессов при нагреве микро- и наноразмерных металлических частиц в однородных или в гетерогенных средах, состоящих из газовой фазы и твердых (жидких) включений в виде горючих частиц (капель).

Представлены оригинальные модели плавления, воспламенения и горения микро- и наночастиц металлов как в рамках феноменологического, так и молекулярно-динамического подхода, позволяющие с определенной точностью описать эти явления.

Публикуется в соответствии с решением Ученого совета ИТПМ СО РАН.

УДК 621.365.91:544.654.2

ISBN 978-5-7782-3290-7

© Фёдоров А.В., Шульгин А.В., 2017  
© Новосибирский государственный  
технический университет, 2017

A.V. FEDOROV, A.V. SHULGIN

MODELING OF PHYSICAL  
AND CHEMICAL  
TRANSFORMATIONS  
IN METAL MICRO-  
AND NANOPARTICLES

Monograph

NOVOSIBIRSK

2017

УДК 621.365.91:544.654.2

Ф 333

Reviewers:

D. Sc., Professor, Head. Lab. Khristianovich ITAM SB RAS *O.B. Kovalev*,

D. Sc., Professor, Head. Lab. Lavrentiev IH SB RAS *I.V. Yakovlev*

**Fedorov A.V.**

Ф 333 Modeling of physical and chemical transformations in metal micro- and nano-particles / A.V. Fedorov, A.V. Shulgin. – Novosibirsk: NSTU Publisher, 2017. – 268 p.

ISBN 978-5-7782-3290-7

The monograph is devoted to the problems of mathematical modeling of dynamic processes of metallic micro- and nanoparticles occurring under thermal loading of homogeneous or heterogeneous media consisting of gases and solid / liquid inclusions. New models of ignition and combustion of such particles are considered. Verification was carried out. Phenomenological and molecular-dynamic approaches are used as a research method, which allow describing the melting, ignition and burning of a solid phase. The book will be useful for students, undergraduates, graduate students and specialists in the field of mechanics of heterogeneous reactive media and explosion and fire safety of industrial plants based on working bodies in the form of reactive heterogeneous media. Some stages of the work were supported by RFBR projects, in recent years RFBR 15-08-01947\_a and RSF 16-19-00010.

Published according to the decision of the Academic Council of ITAM SB RAS.

УДК 621.365.91:544.654.2

ISBN 978-5-7782-3290-7

© Fedorov A.V., Shulgin A.V., 2017

© Novosibirsk State

Technical University, 2017

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|   |           |
|---|-----------|
| Введение .....  | 5         |
| Библиографический список к введению .....   | 13        |
| <b>ГЛАВА 1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДИНАМИКИ СПЛОШНЫХ<br/>И ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД .....</b>  | <b>15</b> |
| § 1.1. Основные уравнения механики гомогенной химически активной<br>среды .....   | 17        |
| 1.1.1. Законы сохранения .....  | 17        |
| 1.1.2. Основные уравнения для описания течения вязкой тепло-<br>проводной смеси реагирующих газов с учетом перемешива-<br>ния ..... | 24        |
| § 1.2. Математические модели для описания движения смеси газа и<br>мелких твердых частиц .....                                      | 29        |
| 1.2.1. Основные уравнения для описания гетерогенной смеси<br>газа и твердых частиц с учетом их собственного давления .....          | 29        |
| 1.2.2. Основные уравнения для описания течения смеси газа и<br>реагирующих частиц, различные приближения данной<br>модели .....     | 38        |
| § 1.3. Химические превращения в газовзвесах в режиме взаимодей-<br>ствующих континуумов .....                                       | 42        |
| 1.3.1. Основные уравнения взаимодействующих континуумов с<br>учетом конкретного вида неравновесной химической ре-<br>акции .....    | 43        |
| 1.3.2. Воспламенение газовзвеси в континуальном режиме .....  | 47        |
| § 1.4. Численное исследование течений композитных реагирующих<br>смесей .....   | 58        |
| 1.4.1. Уравнения механики гетерогенных сред для описания<br>движения к-смеси .....  | 58        |
| 1.4.2. Детонация в смеси реагирующих газов и реагирующих<br>частиц .....  | 61        |
| 1.4.3. Тепловой взрыв в смеси капель и твердых частиц .....   | 68        |
| Библиографический список к главе 1 .....  | 71        |

|   |     |
|---|-----|
| <b>ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОПИСАНИЯ</b>  |     |
| <b>ОДНОМЕРНЫХ И ПЛОСКИХ ЗАДАЧ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ</b>   |     |
| <b>ОДИНОЧНЫХ ЧАСТИЦ И ИХ СОВОКУПНОСТЕЙ</b> ..... 75   |     |
| § 2.1. Дискретно-континуальная модель распространения пламени в газозвеси металлических частиц. Одномерное приближение.....         | 75  |
| 2.1.1. Модель реагирующей частицы металла .....   | 76  |
| 2.1.2. Количественное описание процесса окисления магниевой частицы .....   | 77  |
| 2.1.3. Распространение пламени в облаке частиц магния.....  | 81  |
| Выводы.....   | 98  |
| § 2.2. Дискретно-континуальная модель распространения пламени в газозвеси металлических частиц. Учет предпламенного окисления ..... | 99  |
| 2.2.1. Основные уравнения .....   | 99  |
| 2.2.2. Обсуждение результатов .....   | 100 |
| Выводы.....   | 104 |
| § 2.3. Сопряженная распределенная математическая модель воспламенения образцов магния.....  | 105 |
| 2.3.1. Физико-математическая постановка задачи .....  | 105 |
| 2.3.2. Стационарное приближение.....  | 107 |
| 2.3.3. Нестационарная задача .....  | 110 |
| 2.3.4. Тестирование .....   | 112 |
| 2.3.5. Обсуждение численных результатов .....   | 113 |
| Выводы.....   | 117 |
| § 2.4. Численное моделирование частицы магния в неоднородном тепловом поле .....  | 118 |
| 2.4.1. Постановка задачи и алгоритм численного решения .....  | 118 |
| 2.4.2. Обсуждение численных результатов .....   | 121 |
| § 2.5. Математическая модель воспламенения магния в расширенном диапазоне параметров.....   | 123 |
| 2.5.2. Стационарная задача .....  | 125 |
| 2.5.3. Нестационарная задача .....  | 127 |
| 2.5.4. Обсуждение результатов расчетов.....   | 128 |
| Выводы.....   | 134 |
| Библиографический список к главе 2.....   | 135 |

|   |  |            |
|---|--|------------|
| <b>ГЛАВА 3. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОПИСАНИЯ ПЛОСКИХ ЗАДАЧ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ЧАСТИЦ МЕТАЛЛА.....</b>    |  | <b>137</b> |
| § 3.1. Воспламенение и горение частиц магния в неоднородном тепловом поле .....                             |  | 137        |
| 3.1.1. Физико-математическая постановка задачи .....  |  | 138        |
| 3.1.2. Обсуждение численных результатов .....   |  | 140        |
| Выводы.....   |  | 154        |
| § 3.2. Моделирование горения частицы магния (задача Стефана) .....  |  | 154        |
| 3.2.1. Физико-математическая постановка задачи .....  |  | 155        |
| 3.2.2. Обсуждение численных результатов .....   |  | 159        |
| Выводы.....   |  | 163        |
| § 3.3. Физико-математическая модель воспламенения частиц алюминия с учетом плавления .....                  |  | 163        |
| 3.3.1. Постановка задачи.....   |  | 165        |
| 3.3.2. Верификация модели .....   |  | 169        |
| 3.3.3. Стадия воспламенения в детонации газозвесей частиц алюминия в кислороде.....                         |  | 172        |
| 3.3.4. Универсальный температурный критерий воспламенения взвесей алюминия .....                            |  | 175        |
| 3.3.5. Фактор воспламенения в случае ячеистой детонации .....   |  | 177        |
| Выводы.....   |  | 180        |
| Библиографический список к главе 3.....   |  | 181        |
| <b>ГЛАВА 4. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НАНОЧАСТИЦАХ.....</b>              |  | <b>185</b> |
| § 4.1. Математическое моделирование плавления наноразмерных частиц алюминия и золота (задача Стефана) ..... |  | 185        |
| 4.1.1. Аппроксимация зависимости температуры плавления от радиуса .....                                     |  | 187        |
| 4.1.2. Физико-математическая постановка задачи .....  |  | 190        |
| 4.1.3. Обсуждение численных результатов .....   |  | 191        |
| Выводы.....   |  | 196        |
| § 4.2. Комплексное моделирование плавления наночастицы алюминия.....  |  | 196        |
| 4.2.1. Некоторые понятия молекулярно-динамического подхода .....  |  | 197        |
| 4.2.2. Организация расчетов .....   |  | 202        |
| 4.2.3. Обсуждение результатов .....   |  | 204        |
| Выводы.....   |  | 208        |



---

|   |     |
|---|-----|
| § 4.3. Молекулярно-динамическое моделирование плавления наночастиц алюминия методом внедренного атома.....                                | 208 |
| Выводы.....   | 214 |
| § 4.4. Молекулярно динамическое и феноменологическое моделирование нагрева наночастицы алюминия .....                                     | 215 |
| Выводы.....   | 223 |
| § 4.5. Математическое моделирование плавления наноразмерных частиц металла .....  | 223 |
| 4.5.1. Физико-математическая постановка задачи о плавлении сферического и цилиндрического образцов алюминия .....                         | 224 |
| 4.5.2. Обсуждение численных результатов .....   | 225 |
| Выводы.....   | 232 |
| § 4.6. Точечная модель горения наночастиц алюминия в отраженной ударной волне.....  | 233 |
| 4.6.1. Физико-математическая модель горения алюминиевых наночастиц в смеси $O_2$ , $N_2$ в диапазоне давлений $p_0 \in [8, 32]$ атм ..... | 235 |
| 4.6.2. Обсуждение численных результатов .....   | 238 |
| Выводы.....   | 240 |
| Библиографический список к главе 4.....   | 241 |
| Заключение.....   | 247 |
| Приложение.....   | 251 |