

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МИКРО- И НАНОЧАСТИЦАХ

А.В. Федоров

*Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
630090, Новосибирск, Россия*

Тепловая история наночастиц. В докладе представлены исследования тепловой динамики наночастиц некоторых металлов: алюминий, железо, золото а также оксида алюминия. Преставлены полуэмпирические и точные модели молекулярной динамики. Используются потенциалы внедренного атома в различных вариантах. Основная цель исследования – это получение теплофизических параметров нанокристаллов (теплоемкости, теплопроводности, теплоты фазовых переходов и др.) После получения этих характеристик оказалось возможным построение феноменологических моделей плавления и горения наночастиц. Плавление описывалось в рамках распределенной модели типа Стефана, учитывающей зависимость температуры плавления от радиуса частицы, теплофизических параметров от температуры и радиуса частицы. В результате были получены зависимости времени плавления от размера частиц, коррелирующие с данными молекулярно динамического расчета. Для описания горения наночастиц были построены два типа точечных модель: с учетом и без учета процесса плавления. Данные расчетов были сопоставлены с экспериментальными по горению суспензии наночастиц вблизи от торца ударной трубы. Получено неплодое соответствие зависимости времен горения от давления и содержания азота в газозвеси.

Течения гетерогенной детонации в каналах различной геометрии. Для описания новых математических моделей механики гетерогенных сред использующих наночастицы были определены обменные члены в уравнениях сохранения импульса и энергии каждой из фаз, а также конкретизированы правые частив уравнении кинетики процесса горения, критерий воспламенения частиц. В задаче о подавлении наночастицами детонации в смесях реагирующих газов, например силан – воздух были выявлены моды течения, в том числе режим, близкий к «взрыв во взрыве». Проанализированы концентрационные пределы детонации. Математическая модель в двухскоростном двухтемпературном приближении механики гетерогенных сред была применена нами для описания течения гетерогенной детонации в канале с линейным расширением. Были найдены три типа детонационных течений. Остановимся на двух из этих типов. Оказалось, что восстановление детонации в поперечной волне в критических режимах и срыв в докритических режимах происходит по тому же сценарию, что и за прямоугольным уступом. Критические и закритические режимы распространения характеризуются развитием поперечных волн, свойственных ячеистой детонации. Влияние угла наклона стенки на картины течения проявляется в ослаблении и практически полном исчезновении вихревого образования за углом расширения и более быстрым формированием ячеистой структуры при уменьшении угла. Данные результаты опубликованы частично в [1-15].

Работа была частично поддержана грантом РФФИ 15-08-01947.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **A. V. Fedorov and A. V. Shulgin** Complex Modeling of Melting of an Aluminum Nanoparticle // *Combust., Explos., Shock Waves* 49 (4), 442–449 (2013).
2. **A. V. Fedorov and A. V. Shulgin**, “Molecular Dynamics Modeling of Melting of Aluminum Nanoparticles of the Embedded Atom Method // *Comb., Expl., Shock Waves* 51 (3), 333–337 (2015)
3. **A.V. Fedorov, A. V. Shulgin, and S. A. Lavruk** Study of iron nanoparticle melting // *AIP Conference Proceedings* 1770, 030099 (2016)
4. **A. V. Fedorov and A. V. Shulgin** Molecular Dynamics and Phenomenological Simulations of an Aluminum Nanoparticle // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2016, Vol. 52, No. 3, pp. – 45-50. 2016.
5. **A. V. Fedorov, A. V. Shulgin, and S. A. Lavruk** Description of Melting of Aluminum Nanoparticles // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2016, Vol. 52, No. 4.
6. **A. V. Fedorov, A. V. Shulgin** Point Model of Combustion of Aluminum Nanoparticles in the Reflected Shock Wave // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2011, Vol. 47, No. 3, pp. – 289-293.
7. **A. V. Fedorov and T. A. Khmel** Characteristics and Criteria of Ignition of Suspensions of Aluminum Particles in Detonation Processes // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2012, Vol. 48, No. 2, pp. 191–202.
8. **A. V. Fedorov, T. A. Khmel, S.A. Lavruk** The output of a heterogeneous detonation wave into a channel with linear expansion. 1. Distribution modes // *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2017, In print.
9. **Fedorov A.V., Kratova Yu.V., Khmel T.A.** Heterogeneous Detonation Propagation in Channels with Abrupt Area Expansion Eighth International Symposium on Hazard, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, Yokohama, Japan, Sept. 5-10, 2010.
10. **Khmel T.A., Fedorov A.V., Kratova Yu.V.** Critical conditions of heterogeneous detonation propagation in cylindrical ducts with sudden expansion and exit into an open space // *Proceedings of Tenth International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions Bergen, Norway, 10-14 June 2014*. Published by Gen-Con AS, 2014. P. 1103–1111.
11. **Fedorov A.V., Fomin P.A., Fomin V.M., Tropin D.A., Chen J.R.** Mathematical Analysis of Detonation Suppression by Inert Particles. Kao Tech Publishing, Kaohsiung, Taiwan. 2012. 144 p.
12. **Tropin D.A., Fedorov A.V.** Quenching and suppression of detonation waves in the reactive gas mixtures by clouds of inert micro- and nanoparticles / *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 2017 in print
13. **Федоров А.В., Тропин Д. А., Бедарев И.А.** Математическое моделирование подавления детонации водород-кислородной смеси инертными частицами // *Физика горения и взрыва*, 2010, Т. 46, № 3 С. 103-115.
14. **А.В. Федоров, Т.А. Хмель, С.А. Лаврук** Выход волны гетерогенной детонации в канал с линейным расширением. 1. Режимы распространения. ФГВ, принята к печати 2018.