**Дюкаев, Егор Анатольевич.**

## Математическое моделирование инициирования и автоволнового распространения низкотемпературных радиационных химических реакций : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.17. - Томск, 1999. - 157 с.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Дюкаев, Егор Анатольевич

Введение

1. Низкотемпературные радиационные химические превращения и их модели

1.1. Механизм распространения твердофазных радиационных реакций

1.2. Модели низкотемпературных химических реакций

2. -Общие уравнения для моделирования твердофазных химических реакций

2.1. Основные соотношения '

2.2. Одномерная модель распространения реакционного фронта

2.3. Оценка коэффициентов структурного ' и концентрационного расширения

3. Простейшие модели распространения фронта низкотемпературньж химических реакций с учетом температурных, концентрационных и структурных напряжений 3.1. Реакция .хлорирования хлористого бутила

3 Л. I. О кинетической схеме реакции

3 Л ,2. Кинетика разрушения

3 Л. 3. Нестационарная модель

3 Л .4. Стационарная модель

3Л.5. Линеаризованная задача

3 Л.5 Л .Тип стационарных точек задачи

3 Л. 5.2 .Результаты исследования модели

3.1.6. Нелинейная задача

3.2. Низкотемпературная-полимеризация формальдегида

3.2Л. Введение

3.2.2. Основные соотношения

3.2.3. Стационарная модель 62 3.3. Реакции твердофазной детонации азидов инициирующих взрывчатых веществ

3.3.1. Физическая картина процесса

3.3.2. Основные соотношения' модели без учета разрушения

3.3.3. Метод численного решения задачи

3.3.4. Результаты расчетов

3.3.5. Влияние разрушения на режимы твердофазного разложения

4. Учет влияния эффекта релаксации теплового потока на режимы распространения твердофазных реакций

4.1. Эффект релаксации теплового потока

4.2. Гиперболическое уравнение теплопроводности

4.3. Аналитическое решение

4.4. Численный анализ

4.4.1. Линеаризованная' задача 108 ф

4.4.2. Температурные напряжения 109 4.4.3:Концентрационные напряжения 115 4.4.4. Активирование реакции за счет работы механических сил

5. Инициирование низкотемпературных твердофазных химических\* реакций с учетом внутренних, напряжений и деформаций

5.1. Нестационарная модель реакции хлорирования хлористого бутила

5.2. Результаты численного исследования задачи 123 Выводы 142 Литература

ПРИНЯТЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ х - время; х, £ - пространственная координата;

Т, в, в - температура;

Мь, В, II, А, у - концентрация компонента; т| - поврежде.нность среды; индекс «о' соответствует исходному состоянию; индекс у соответствует конечному состоянию; к1 ~ константа скорости реакции 1;

Е[ - энергия активации реакции 1; кг - константа скорости реакции разрушения;

II - энергия активации разрушения; огг; - компоненты тензора.напряжений;

Еу - компоненты тензора деформаций; и - перемещения; у - удельный объем; лу - относительное изменение удельного объема; ск.;, еу8у - первый и второй инварианты тензора деформаций;

К - изотермический модуль всестороннего сжатия;

А., ц - коэффициенты Ламэ,

V - коэффициент Пуассона;

Е - модуль Юнга; р - плотность среды; с8 - теплоемкость при постоянной деформации; т - теплопроводность; т - коэффициент линейного теплового расширения; «к - коэффициент концентрационного расширения;

8 - коэффициент структурного расширения; - коэффициент связности полей температуры и деформации; п - скорость распространения фронта реакции; с - линейная скорость звука;

Ов, Ол, (Ж ^В, - тепловой эффект реакции;

Ук - объем атома сорта к в своей фазе;

- молярная масса; хг - время релаксации теплового потока;

- символ Кронеккера; Ыу - число Авогадро;

- универсальная газовая постоянная; \ - поток компонента к;

1'г - поток тепла; и - скорос ть; р - удельный объем повреждений; gk - химический потенциал: компонента к; ХР - структурный потенциал; Б - энтропия; е - внутренняя энергия; 1г - энтальпия; f - свободная энергия Гельмгольца; g - обобщенный потенциал Гиббса;

ТЧ 6, О, а, ©о, с10к, ¿Ов, адк, аов, а»л, «еа, gв, gk, ёз, у, О', Се', А.Т, 2., Р, ф, О, В, В, г, ш, 80, V, 0Р, у2, т,, - параметры задачи 1 = 1.3.