

Расчет эффективной теплопроводности порошковых материалов из сферических частиц в газовой атмосфере

© Т.С. Волченко, А.П. Яловец

Южно-Уральский государственный университет,
454080 Челябинск, Россия

e-mail: yalovets.alex@rambler.ru

(Поступило в Редакцию 14 апреля 2015 г. В окончательной редакции 27 июля 2015 г.)

Описан метод расчета эффективного коэффициента теплопроводности порошковых материалов из сферических частиц с размерами более $1\ \mu\text{m}$ в газовой атмосфере в широком диапазоне температур и давлений. Учтены структурный фактор порошковой среды, адсорбция газа на поверхности твердых сфер, температурные зависимости коэффициентов теплопроводности компонентов порошковой среды, а при достижении температуры плавления — образование перемычки из расплава между сферами. Для случая полного плавления сфер предложена модель теплопроводности расплава с газовыми включениями. Результаты расчетов эффективной теплопроводности хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Введение

Современные методы расчета формирования температурных полей в гетерогенных средах основаны на применении эффективных коэффициентов теплопроводности (ЭКТ). В зависимости от объемной доли твердые частицы могут быть изолированы друг от друга газовой средой (газовзвеси), либо находятся в контакте между собой (свободно насыпанные порошки). В настоящее время интерес к гетерогенным материалам со структурой свободно насыпанного порошка обусловлен прежде всего развитием технологий селективного лазерного спекания [1,2] и создания покрытий с помощью электронно-лучевых методов [3].

Результаты экспериментальных исследований теплопроводящих свойств порошковых сред в газовой атмосфере представлены зависимостями ЭКТ от давления и температуры среды, размеров частиц и их объемной доли [4–8]. Следует заметить, что приведенные в работах [4–8] теоретические модели устанавливают количественную связь ЭКТ с теплопроводящими свойствами компонент среды, но не описывают его стремление к насыщению при увеличении давления газа.

Исчерпывающий обзор методов описания эффективной теплопроводности гетерогенных сред приведен в [9,10]. Из него следует, что все модели эффективной теплопроводности гетерогенных сред можно разбить на два класса. К первому классу отнесем бесструктурные модели [11–14], которые содержат только данные о теплопроводящих свойствах каждой компоненты гетерогенной среды и ее объемной доле, но не содержат никакой информации о структуре. Ко второму классу будут относиться структурные модели [5,6,8–10], которые учитывают размеры частиц и их взаимное расположение.

Наиболее детально учет структуры гетерогенной среды был выполнен в работах [9,10], где описан метод расчета ЭКТ свободно насыпанных и слабоспеченных порошков. Согласно этой модели, теплопроводящие свойства среды формируются поверхностными контактами

сферических частиц и теплопроводностью газового зазора в окрестности тепловых контактов. Результаты [9,10] достаточно хорошо согласуются с экспериментом при малых давлениях газа (менее $1000\ \text{Torr}$ при $300\ \text{K}$), но не описывают выхода эффективной теплопроводности на насыщение при высоких (более $1000\ \text{Torr}$) давлениях [5].

Для теоретических исследований процессов селективного лазерного спекания необходимым является разработка методов описания ЭКТ порошковой среды, которые учитывают, что при нагреве может происходить частичное или полное плавление материала сфер, приводящее к изменению структуры среды. Отсюда следует важное требование к моделям ЭКТ: структурная модель в пределе полного плавления материала твердых частиц должна давать значение эффективной теплопроводности, которое сшивается с эффективной теплопроводностью, даваемой бесструктурной моделью.

В настоящей работе предлагается метод расчета ЭКТ порошкового материала из одинаковых сферических твердотельных частиц в газовой атмосфере в широком диапазоне давлений и температур. В представленной модели учтены структурный фактор порошкового материала (размеры сфер и их взаимное расположение), теплообмен через газовый зазор с учетом его зависимости от соотношения величины зазора и длины свободного пробега молекул, вклад в теплопроводность полимолекулярной адсорбции газа на поверхности конденсированной фазы, а также температурные зависимости коэффициентов теплопроводности твердотельной и газовой фаз. В случае частичного плавления сфер учтено образование теплового контакта за счет расплава. Для случая полного плавления частиц предлагается метод расчета эффективной теплопроводности расплава с газовыми включениями.

Рассмотрим общую идею реализации данной модели. Для свободно насыпанных порошков характерные значения объемной доли конденсированной фазы $\alpha \geq 0.5$ [1–10]. Сравнение таких значений упаковки

порошковой среды с предельными значениями плотноупакованных сфер в систему с кубической симметрией ($\alpha = 0.52$), или в объемно-центрированную кубическую (ОЦК) структуру ($\alpha = 0.68$), или в гранецентрированную кубическую (ГЦК) ($\alpha = 0.74$) позволяет утверждать, что в свободно насыпанных порошках формируются регулярные структуры с плотными упаковками. Данное обстоятельство позволяет в общем случае задать структурный фактор порошковой среды как композицию различных типов систем (кубической, ОЦК и ГЦК) в соотношениях, обеспечивающих заданную объемную долю конденсированной фазы в порошковой среде. Рассмотрение порошковой среды как системы с определенной симметрией применялось в [6,8–10].

Описывающий явление теплопроводности закон Фурье аналогичен закону Ома, записанному в дифференциальной форме. Этот факт позволяет строить схемы тепловых цепей подобно схемам электрических цепей и рассчитывать тепловые сопротивления или тепловые проводимости по тем же правилам, что и при расчете электрических сопротивлений или проводимостей. Такой подход был реализован, например, в [6].

Таким образом, построение метода расчета ЭКТ порошковых материалов сводится к решению задачи о вычислении теплового сопротивления элементарной ячейки по ее эквивалентной тепловой цепи. Затем находится композиция различных типов систем, обеспечивающих заданную объемную долю конденсированной фазы, и производится вычисление эффективной теплопроводности, усредненной по найденной реализации.

Отметим, что полученные в настоящей работе ЭКТ не учитывают радиационных процессов. Поэтому радиационный перенос тепла должен быть учтен на этапе расчета температурного поля путем добавления радиационного потока энергии к тепловому, выражаемому законом Фурье.

1. Модель эффективной теплопроводности порошковых сред

Полагаем, что теплопроводящие свойства порошковых сред изотропны и могут быть описаны на основе рассмотрения композиции систем с кубической, ОЦК- и ГЦК-симметрией. Параметрами ячейки являются постоянная ячейки a , радиус сфер R , из которых построена ячейка, и количество сфер m , принадлежащих данному типу ячейки. Для кубической ячейки $m = 1$, ОЦК — $m = 2$, ГЦК — $m = 4$. Связь постоянной ячейки заданной симметрии с радиусом сфер и их объемной долей дается выражением

$$a = R(4\pi m/3\alpha)^{1/3}. \quad (1)$$

Для вычисления ЭКТ порошковых материалов применительно к задачам лазерного или электронного спекания порошков необходимо рассмотрение теплопроводящих свойств газа при давлениях, не превышающих нескольких тысяч Торг. В этом случае газ можно считать идеальным. В порошковых материалах с плотной

упаковкой сферических частиц толщина газового зазора по мере приближения к точке соприкосновения сфер стремится к нулю, что требует учета зависимости коэффициента теплопроводности от соотношения длины свободного пробега молекул и толщины зазора. В [9,10] предложена аппроксимационная формула для расчета коэффициента теплообмена через газовый зазор, которая дает точные свободномолекулярные и кондуктивные пределы, а также хорошо описывает переходные режимы. Здесь эта формула представлена в виде выражения для коэффициента теплопроводности газа κ_0 , зависящего от величины зазора l :

$$\kappa_0(l, T, P) = \frac{\kappa^{(0)}(T)}{2} \tilde{l} \left(1/(1 + \tilde{l}) + 1/(1 + \sqrt{\tilde{l}})^2 \right), \quad (2)$$

где $\tilde{l} = l/l_0$,

$$l_0 = 4\kappa^{(0)}((\gamma - 1)/(\gamma + 1))P^{-1}\sqrt{\pi MT/2R_g},$$

$\kappa^{(0)}(T)$ — теплопроводность газа при температуре T в неограниченном объеме ($\tilde{l} \gg 1$), γ — показатель адиабаты, P — давление, M, R_g — соответственно масса киломоля газа и универсальная газовая постоянная.

1.1. Эффективная теплопроводность структуры с кубической симметрией

Найдем тепловое сопротивление кубической ячейки в направлении [100]. Для этого достаточно рассмотреть элемент ячейки, заключенный в объеме $IJKL'I'K'L'$ (рис. 1, *a*). Данный элемент представляет собой куб с ребром, равным постоянной кубической решетки a , и включает две полусферы, погруженные в газовую среду. Весь объем порошковой среды можно воспроизвести путем многократного повторения в трех различных направлениях выбранного структурного элемента.

Из рис. 1, *b* следует, что тепловые проводимости элементов полусферы (1) с длиной l_1 и площадью $dS = 2\pi r dr$ и заключенного между полусферами газа (0), зазор которого $l(r) = a - 2\sqrt{R^2 - r^2}$, имеют вид

$$d \frac{1}{\mathcal{R}_1} = \kappa_1 \frac{dS}{l_1} = \frac{\kappa_1 2\pi r dr}{\sqrt{R^2 - r^2}}, \quad (3a)$$

$$d \frac{1}{\mathcal{R}_0} = \frac{\kappa_0(l) 2\pi r dr}{l(r)}, \quad (3b)$$

где коэффициенты теплопроводности твердотельной фазы — κ_1 , газа — $\kappa_0(l)$, который описывается выражением (2). Интегрируя (3a) и учитывая, что в рассматриваемом объеме находится две полусферы, получим

$$1/\mathcal{R}_1 = \pi \kappa_1 R. \quad (4)$$

В выражении (3b) удобно перейти к переменной l — длине газового зазора:

$$\frac{1}{\mathcal{R}_0} = \frac{\pi}{2} \int_{a-2R}^a \frac{\kappa_0(l)(a-l)dl}{l}. \quad (5)$$

С учетом (2) интеграл (5) вычисляется аналитически.

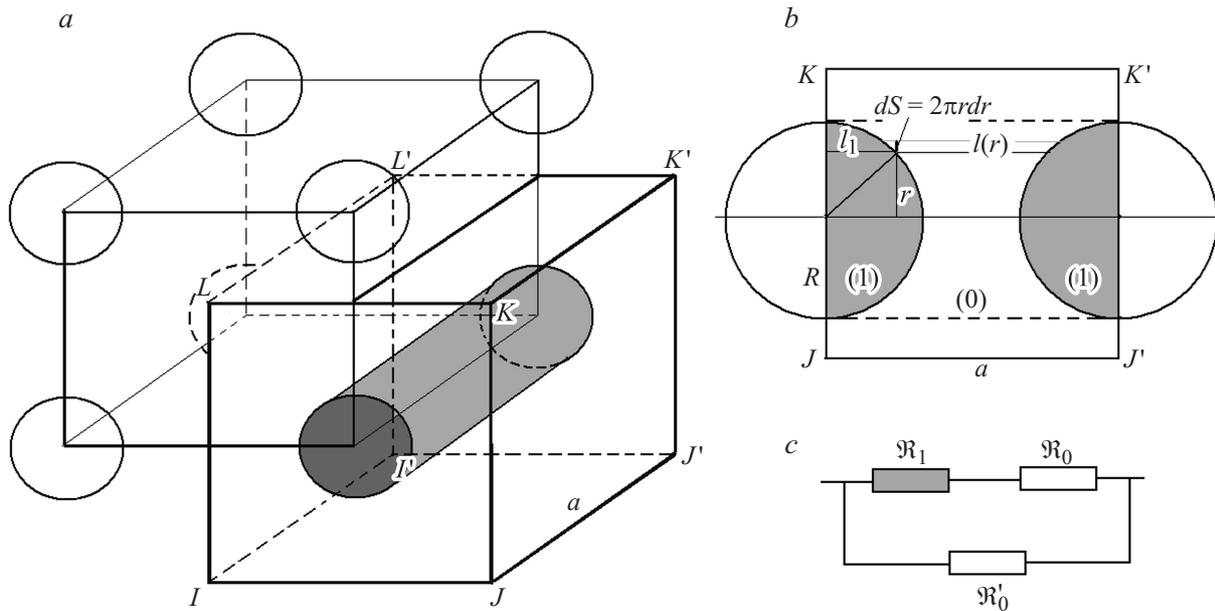


Рис. 1. Структурный элемент для расчета эффективной теплопроводности кубической ячейки — a и его вид со стороны плоскости $JJ'K'K$ — b ; эквивалентная тепловая схема структурного элемента — c . Обозначения: \mathcal{R}_1 — тепловое сопротивление двух входящих в структурный элемент твердых полусфер (1); \mathcal{R}_0 — сопротивление газа (0), заключенного в объеме между полусферами; \mathcal{R}'_0 — сопротивление газа, находящегося в не перекрытом сферами (1) объеме.

Тепловое сопротивление остальной части газа рассматриваемого структурного элемента вычисляется аналогично

$$1/\mathcal{R}'_0 = \kappa_0(a)a(1 - \pi R^2/a^2). \quad (6)$$

Вычисляя полное тепловое сопротивление \mathcal{R}_c данного структурного элемента с учетом эквивалентной тепловой схемы, приведенной на рис. 1, c , выражений (4)–(6), найдем ЭКТ среды κ_c :

$$\kappa_c = 1/\mathcal{R}_c a, \quad (7)$$

где

$$1/\mathcal{R}_c = 1/(\mathcal{R}_0 + \mathcal{R}_1) + 1/\mathcal{R}'_0.$$

1.2. Эффективная теплопроводность структуры с ОЦК-симметрией

Будем вычислять тепловое сопротивление ОЦК-ячейки в направлении $[100]$ аналогично предыдущему случаю, от которого данную структуру отличает только наличие сферы в центре ячейки. Рассмотрим элемент ОЦК-ячейки, такой же, как на рис. 1, a . Данный элемент представляет собой куб с ребром, равным постоянной ячейки a , включает две полусферы A и четыре сегмента сфер B , которые находятся в центрах ОЦК-ячейки (рис. 2, a). Из рис. 2, b следует выражение для полного теплового сопротивления ОЦК-решетки:

$$1/\mathcal{R}_{bcc} = 1/(\mathcal{R}_1^A + \tilde{\mathcal{R}}_B) + 1/\mathcal{R}'_0, \quad (8)$$

$$1/\tilde{\mathcal{R}}_B = 1/\mathcal{R}_B + 1/\mathcal{R}_0^A.$$

В (8) величина \mathcal{R}_1^A описывается формулой (4), а \mathcal{R}_0^A , как следует из рис. 3, a, b , определяется как

$$1/\mathcal{R}_0^A = 1/\mathcal{R}_0 - 4/\mathcal{R}'_0{}^{AB}, \quad (9)$$

где \mathcal{R}_0 находится по формуле (5), $\mathcal{R}'_0{}^{AB}$ — тепловое сопротивление газа в области $A-B-A$ (полагая, что газ занимает и области сегментов B). Поскольку вычисляется тепловое сопротивление части объема газа между полусферами $A-A$, выражение для $d(1/\mathcal{R}'_0{}^{AB})$ в отличие от выражения (3b) записано для элемента площади, изображенного на рис. 3, b . Определим область изменения угла $\varphi_{\min} \leq \varphi \leq \pi/2$, где значение φ_{\min} определяется с помощью теоремы косинусов при $r' = R$ (рис. 3, b): $\sin \varphi_{\min}(r) = (b^2 - R^2 + r^2)/2br$. В итоге имеем

$$\frac{1}{\mathcal{R}'_0{}^{AB}} = \int_{b-R}^R dr r \frac{\kappa_0(l)(\pi - 2\varphi_{\min}(r))}{l(r)} \quad \text{при } 2R > b \geq R. \quad (10)$$

Тепловое сопротивление остальной части газа \mathcal{R}'_0 рассматриваемого структурного элемента записывается аналогично (6) и имеет вид

$$1/\mathcal{R}'_0 = \kappa_0(a)a(1 - S_{AB}/a^2), \quad (11)$$

где $S_{AB} = \pi R^2 + S_B$, S_B — площадь не перекрывающихся сегментов сфер B со сферой A (рис. 2, a). Величина S_B есть площадь не перекрывающейся части дисков одинакового радиуса, находящихся в одной плоскости с разнесенными на расстояние b центрами.

Как следует из рис. 3, c , \mathcal{R}_B имеет вид $\mathcal{R}_B = \mathcal{R}_1^B + \tilde{\mathcal{R}}_0$, где $1/\tilde{\mathcal{R}}_0 = 1/\mathcal{R}_0^B + 1/\mathcal{R}'_0{}^{AB}$. Из рис. 2, a , 3, a следует,

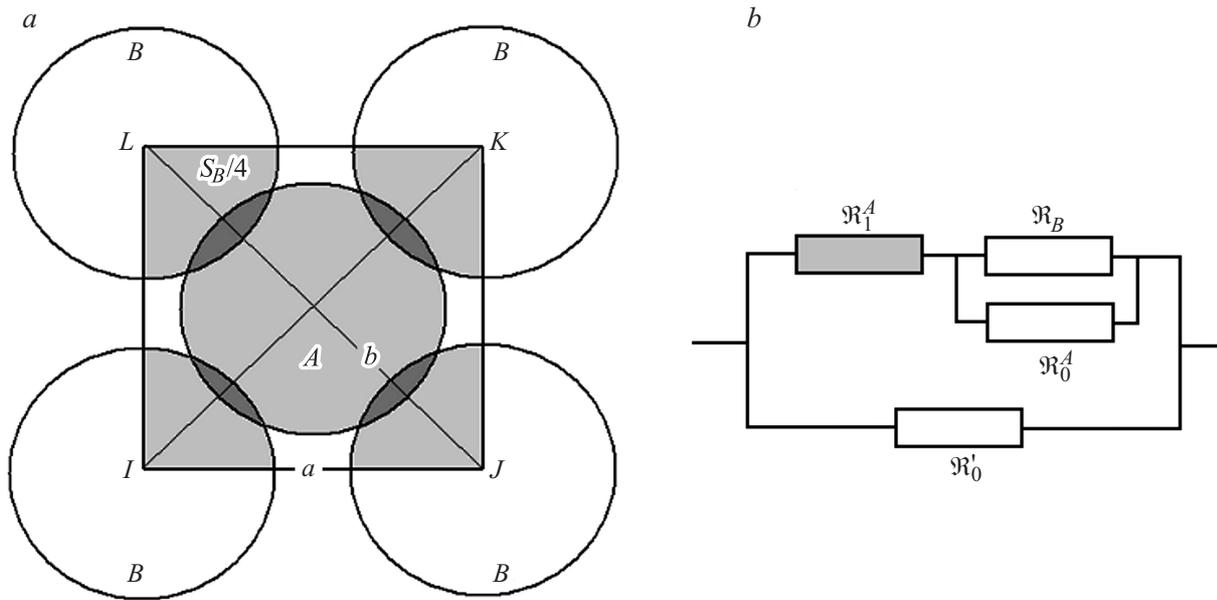


Рис. 2. Вид структурного элемента для расчета эффективной теплопроводности ячейки с ОЦК-симметрией со стороны плоскости $IJKL$ — a ; эквивалентная тепловая схема структурного элемента — b . Обозначения: b — расстояние от центра сферы B до оси, проходящей через центры сфер A ; \mathcal{R}_1^A — тепловое сопротивление двух входящих в данный структурный элемент полу сфер A ; \mathcal{R}_0^A — сопротивление газа в промежутке $A-A$, не содержащем сегменты B ; \mathcal{R}_0' — сопротивление остальной (не перекрытой сферами A и B) части газа рассматриваемого структурного элемента; \mathcal{R}_B — сопротивление входящего в данный структурный элемент четырех сегментов сфер B и газа, заключенного в перекрытом сферами A и B объеме.

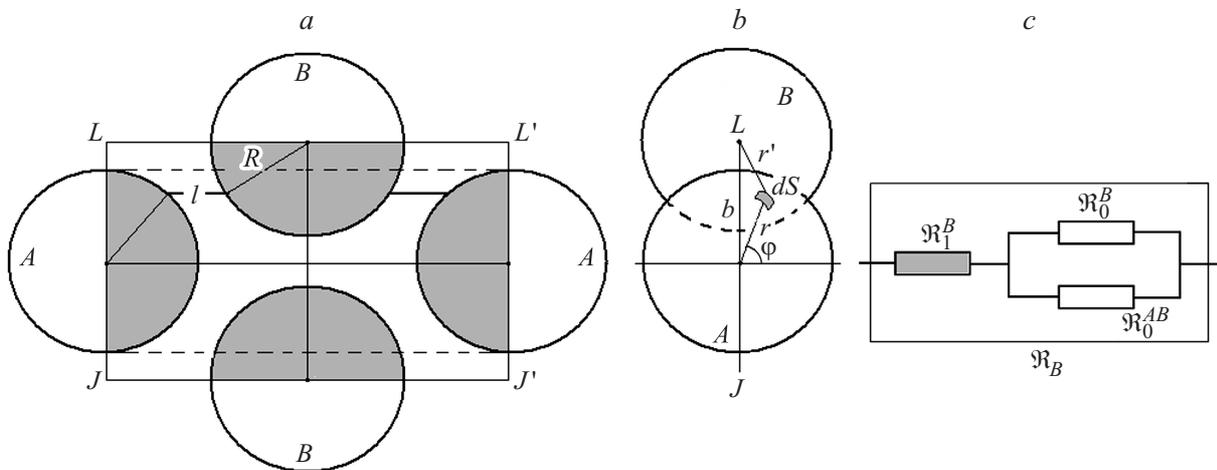


Рис. 3. Взаимное расположение сфер из рис. 2, a в плоскости $JJ'L'L$ — a ; взаимное расположение сфер A и B со стороны плоскости $IJKL$ — b ; эквивалентная схема теплового сопротивления \mathcal{R}_B — c . Обозначения: \mathcal{R}_1^B — тепловое сопротивление четырех сегментов сфер B , \mathcal{R}_0^B — сопротивление газа, заключенного между сферами $A-B-A$, \mathcal{R}_0^{AB} — сопротивление газа, заключенного в объеме, перекрытом только сферами B .

что \mathcal{R}_1^B описывается формулой (4), а тепловое сопротивление \mathcal{R}_0^B выражается через тепловое сопротивление \mathcal{R}_0 (5):

$$1/\mathcal{R}_0^B = (S_B/\pi R^2)\mathcal{R}_0^{-1}. \tag{12}$$

Тепловое сопротивление газового остатка \mathcal{R}_0^{AB} , заключенного между сферами $A-B-A$, находится, как следует из рис. 3, a, b , интегрированием выражения

$$d(1/\mathcal{R}_0^{AB}) = \kappa_0(l) r dr d\varphi / l(r, \varphi),$$

где

$$r, r' = \sqrt{b^2 - 2br \sin \varphi + r^2}$$

— соответственно расстояния от центров сфер A и B до линии, проходящей через отрезок

$$l(r, \varphi) = a/2 - (\sqrt{R^2 - r^2} + \sqrt{R^2 - r'^2}),$$

который определяет зазор между поверхностями сфер. Отметим, что изображенный на рис. 3, a отрезок l задает

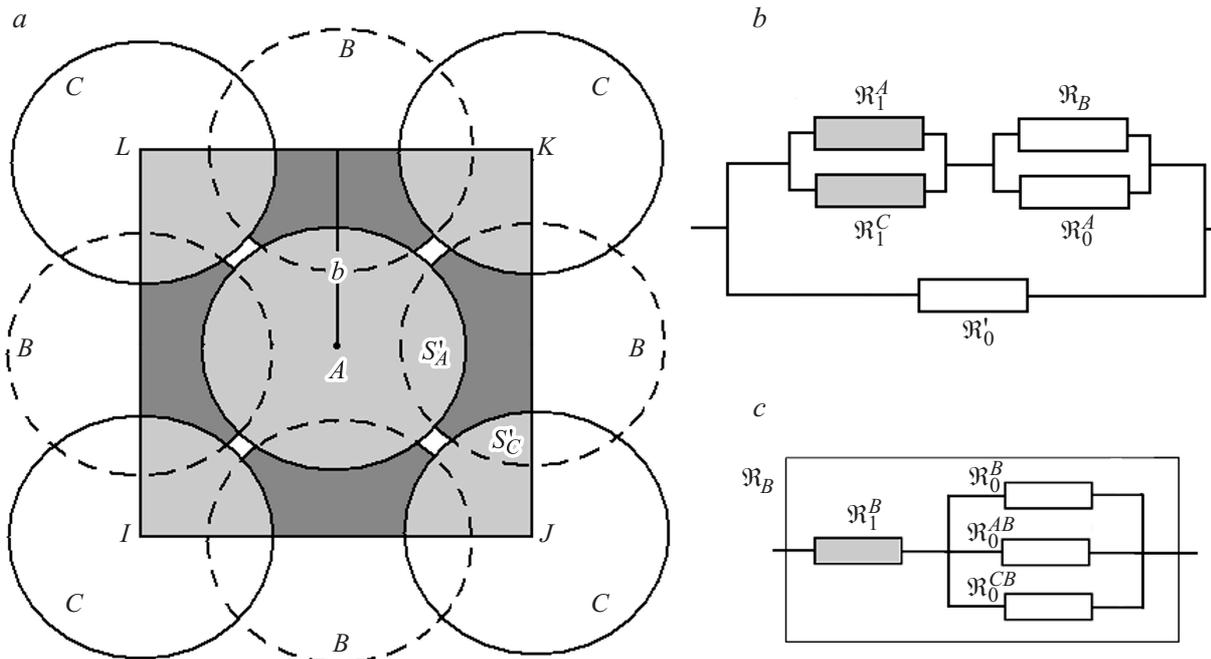


Рис. 4. Вид структурного элемента для расчета эффективной теплопроводности ячейки с ГЦК-симметрией со стороны плоскости $IJKL$ — a ; эквивалентная тепловая схема данного структурного элемента — b ; эквивалентная схема теплового сопротивления \mathcal{R}_B — c . Обозначения: b — расстояние от центра сферы B до оси, проходящей через центры сфер A ; $\mathcal{R}_1^A, \mathcal{R}_1^C$ — соответственно тепловые сопротивления двух входящих в данный структурный элемент полуфер A и восьми сегментов сфер C ; \mathcal{R}_0^A — сопротивление газа в промежутке A – A , не содержащем сегменты B ; \mathcal{R}_0' — сопротивление объема газа, не перекрытого сферами A, B и C ; \mathcal{R}_1^B — сопротивление входящих в данный структурный элемент четырех сегментов сфер B ; \mathcal{R}_0^B — сопротивление газа, заключенного в объеме, перекрытом только сферами B ; $\mathcal{R}_0^{AB}, \mathcal{R}_0^{CB}$ — сопротивления газа в объемах, заключенных в промежутках между сферами A, B и C, B .

половину газового зазора в рассматриваемой ячейке. Удваивая l и интервал интегрирования по углу, а также учитывая то, что количество сегментов сфер B равно четырем, получим

$$\frac{1}{\mathcal{R}_0^{AB}} = 4 \int_{b-R}^R dr r \int_{\varphi_{\min}}^{\pi/2} \frac{\kappa_0(l) d\varphi}{l(r, \varphi)}. \quad (13)$$

Интегралы (10) и (13) находятся численно. По формуле, аналогичной (7), используя (8)–(13), находим ЭКТ среды κ_{bcc} , состоящей из ячеек с ОЦК-симметрией.

1.3. Эффективная теплопроводность структуры с ГЦК-симметрией

Рассмотрим элемент ГЦК-ячейки, такой же, как на рис. 1, a . Данный элемент представляет собой куб с ребром, равным постоянной кубической решетки a , включает две полусферы A , четыре сегмента сфер B и восемь сегментов сфер C (рис. 4, a). Отметим, что сферы B и C находятся в центрах граней ГЦК-ячейки. Центры сфер A и C находятся в одной плоскости.

Суммарный объем всех входящих в данный структурный элемент сегментов сфер C равен объему сферы A , из чего следует, что $\mathcal{R}_1^C = \mathcal{R}_1^A$. Значение \mathcal{R}_1^A вычисляется по формуле (4). Тепловое сопротивление \mathcal{R}_0^A

вычисляется по формулам (9) и (10). Сопротивление \mathcal{R}_0' описывается выражением, аналогичным (6) или (11):

$$1/\mathcal{R}_0' = \kappa_0(a) a (1 - S_{ABC}/a^2), \quad (14)$$

где $S_{ABC} = 2\pi R^2 + S_B$, S_B — площадь неперекрывающихся сегментов сфер B со сферами A и C . Как видно из рис. 4, a , в случае, если $b < 2R$, одна сфера B может перекрываться сферой A и двумя сферами C , причем одна область перекрытия B и C $S'_C = S'_A/2$, где S'_A — область перекрытия сфер B и A . Поэтому не затененная площадь четырех сфер B имеет вид $S_B = 4(\pi R^2/2 - 2S'_A)$. Вычислить S'_A можно так же, как это было описано при обсуждении выражения (11).

Поскольку в данный структурный элемент входят четыре сегмента сфер B с общим объемом, вдвое превышающим объем сферы A (рис. 4, a), то

$$\mathcal{R}_1^B = \mathcal{R}_1^A/2. \quad (15)$$

Тепловое сопротивление газа \mathcal{R}_0^B находится по формуле, аналогичной (12):

$$1/\mathcal{R}_0^B = (S_B/2\pi R^2) \mathcal{R}_0^{-1}. \quad (16)$$

Данное выражение отличается от (12) двойкой в знаменателе, которая учитывает тот факт, что в рассматриваемой ячейке (рис. 4, a) вклад в тепловую проводимость дают четыре полусферы B .

Поскольку суммарные области перекрытия сфер AB и CB одинаковы, тепловые сопротивления газовых зазоров между этими сферами равны, т.е. $\mathcal{R}_0^{CB} = \mathcal{R}_0^{AB}$. Величина \mathcal{R}_0^{AB} находится из (13).

Из эквивалентных тепловых схем, представленных на рис. 4, b, c , следуют выражения для \mathcal{R}_B и полного теплового сопротивления ГЦК-ячейки \mathcal{R}_{fcc} :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_B &= \mathcal{R}_1^B + \tilde{\mathcal{R}}_0, & 1/\tilde{\mathcal{R}}_0 &= 1/\mathcal{R}_0^B + 2/\mathcal{R}_0^{AB}, \\ 1/\mathcal{R}_{fcc} &= 1/(\mathcal{R}_1^A/2 + \tilde{\mathcal{R}}_B) + 1/\mathcal{R}_0^A, \\ 1/\tilde{\mathcal{R}}_B &= 1/\mathcal{R}_B + 1/\mathcal{R}_0^A. \end{aligned}$$

Вычисление \mathcal{R}_B производится по формулам (13), (15), (16), а \mathcal{R}_{fcc} — (4), (9), (10) и (14). По значению \mathcal{R}_{fcc} и формуле, аналогичной (7), находится ЭКТ среды κ_{fcc} , состоящей из ячеек с ГЦК-симметрией.

1.4. Композиция типов элементарных ячеек

В случае плотной упаковки порошковых материалов реализация заданной объемной доли конденсированной фазы может быть получена путем аддитивного (без взаимного проникновения) смешивания различных элементарных ячеек. Как известно, каждая ячейка с заданной симметрией характеризуется максимальным значением объемной доли конденсированной фазы. Поэтому если объемная доля порошкового материала $0.52 < \alpha < 0.68$, то заданная объемная доля может быть получена различными композициями элементарных ячеек: 1) куб. + ОЦК; 2) куб. + ГЦК; 3) куб. + ОЦК + ГЦК. Если же $\alpha > 0.68$, то возможно смешивание ячеек ОЦК + ГЦК. Для случаев не плотной упаковки ($\alpha < 0.5$) заданная объемная доля порошковой среды может быть реализована произвольной композицией элементарных ячеек, если постоянная ячейки определена из выражения (1).

В общем случае ЭКТ порошкового материала, представленного как композиция упаковок с различным типом ячеек, можно представить в виде

$$\kappa_{\text{eff}} = \sum_i \gamma_i \kappa_{\text{eff}}^i, \quad (17)$$

где $\kappa_{\text{eff}}^i, \gamma_i$ — соответственно ЭКТ среды, задаваемой i -м типом ячейки и доля поверхности этого типа ячейки в сечении порошковой среды.

Определим γ_i по заданной объемной доле α . Обозначим через N_i — количество ячеек i -го типа в объеме порошковой среды V, V_i, α_i — объем ячейки и объемная доля конденсированной фазы в ячейке i -го типа. Тогда имеют место равенства

$$V = \sum_i V_i N_i; \quad \alpha = \sum_i \alpha_i V_i N_i / \sum_i V_i N_i. \quad (18)$$

Концентрация ячеек i -го типа определяется как $n_i = N_i/V$. Поскольку $V_i^{2/3}$ — площадь грани ячейки, а

$n_i^{2/3}$ — среднее количество ячеек в единице площади поперечного сечения порошкового материала, запишем выражение для средней поверхности, приходящейся на ячейку i -го типа в единице площади порошковой среды

$$S_i = (n_i V_i)^{2/3}. \quad (19)$$

Очевидно, что в общем случае, $\sum S_i \neq 1$, поскольку в смеси ячеек разного типа часть ячеек в объеме порошковой среды будут перекрывать друг друга. Поэтому для оценки поверхностной доли, приходящейся на ячейку i -го типа, значения (19) нормируются

$$\gamma_i = S_i / \sum_k S_k. \quad (20)$$

В случае композиции из двух типов ячеек ($i = 1, 2$) при $\alpha_1 \leq \alpha \leq \alpha_2$ второе равенство (18) позволяет выразить отношение $x = N_2/N_1$ через заданное значение α : $x = V_1(\alpha - \alpha_1)/V_2(\alpha_2 - \alpha)$. Выражая через x концентрации ячеек $n_1 = 1/(V_1 + xV_2); n_2 = x/(V_1 + xV_2)$, определим по формулам (19), (20) поверхностные доли γ_1, γ_2 .

В случае композиции из трех типов ячеек ($i = 1, 2, 3$) при $\alpha_1 \leq \alpha \leq \alpha_3$ второе равенство (18) имеет вид

$$\alpha = (\alpha_1 V_1 + \alpha_2 V_2 x + \alpha_3 V_3 y) / (V_1 + V_2 x + V_3 y), \quad (21)$$

где $x = N_2/N_1, y = N_3/N_1$.

Как видно из (21), возможны разные комбинации смешивания типов ячеек, которые обеспечат заданное значение объемной доли конденсированного материала в порошковой среде, т.е. для нахождения x и y требуется дополнительное условие. Наиболее простой способ решения данной задачи заключается в последовательном смешивании двух типов ячеек: (22a) 1 и 2 ($y = 0$); (22b) 1 и 3 ($x = 0$):

$$y = 0; \quad \alpha = \frac{\alpha_1 V_1 + \alpha_2 V_2 x'}{V_1 + V_2 x'}, \quad (22a)$$

$$x = 0; \quad \alpha = \frac{\alpha_1 V_1 + \alpha_3 V_3 y'}{V_1 + V_3 y'}. \quad (22b)$$

Из выражений (22a), (22b) находятся значения x' и y' , которые удовлетворяют заданному значению α . Из (22a), (22b) следует выражение, аналогичное (21), в котором $x = 0.5x', y = 0.5y'$. Выражения для концентраций ячеек имеют вид $n_1 = 1/\tilde{V}; n_2 = x/\tilde{V}; n_3 = y/\tilde{V}$, где $\tilde{V} = V_1 + xV_2 + yV_3$. Данные концентрации позволяют по формулам (19), (20) найти поверхностные доли $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, а также обеспечивают равенства (18).

1.5. Физическая адсорбция и ее роль в формировании теплопроводящих свойств порошковых сред

Приведенные выше формулы для расчета ЭКТ порошковых сред дают значения, которые отличаются от экспериментальных данных на 20–40%. Кроме того, полученные непосредственно по приведенным выше формулам зависимости ЭКТ от давления не дают

экспериментально наблюдаемого выхода на постоянное значение при высоких давлениях.

Как отмечено в [7] и как видно из выражений (5), (13), основной вклад в теплопроводность порошковых материалов дает область вблизи контакта между частицами. Следовательно, можно предположить, что ЭКТ будет зависеть от состояния поверхности твердотельных частиц. Наиболее существенным фактором, определяющим состояние и свойства твердотельной поверхности, является адсорбция. Как показано в [15], адсорбционные процессы на поверхности твердых частиц в наножидкости оказывают существенное влияние на эффективную теплопроводность суспензии.

В монографии [16] отмечено, что физическая адсорбция — полимолекулярная адсорбция, при которой имеет место одновременная адсорбция на поверхности твердого тела и на ранее адсорбированных молекулах первого, второго и других слоев. Также в [16] сообщается, что при достаточно больших покрытиях поверхности состояние адсорбированного слоя близко к жидкому.

Здесь для учета влияния адсорбированного слоя на теплопроводящие свойства порошковой среды требуется задание зависимости толщины адсорбционной оболочки δ и ее средней массовой плотности ρ_a от термодинамического состояния окружающего твердого тела газа. В [16] дано описание теоретических моделей полимолекулярной адсорбции, которые позволяют в принципе найти лишь произведение $\rho_a \delta$.

Другой путь решения проблемы заключается в подборе эмпирических моделей адсорбции. Примером такого эмпирического подхода является уравнение изотермы адсорбции Фрейндлиха [16], которое представляет собой степенную зависимость количества адсорбции от давления. Запишем уравнение для δ по аналогии с уравнением Фрейндлиха в виде степенной зависимости

$$\delta = \delta_m (P/P_m)^\Delta, \quad (23)$$

где δ_m — толщина монослоя, которая полагается равной диаметру адсорбированной молекулы, Δ — константа, P_m — параметр, который в общем случае будет зависеть от температуры и кривизны поверхности твердого тела.

Для описания зависимости параметра P_m от термодинамического состояния окружающего твердотельную поверхность газа примем во внимание качественную аналогию между процессами адсорбции газа на поверхности твердого тела и конденсации пара на поверхности жидкости. Следуя этой аналогии, положим, что параметр P_m определяет скорость адсорбции так же, как давление насыщенных паров определяет скорость конденсации пара. Тогда для параметра P_m применим ряд известных для насыщенного пара соотношений. Зависимость параметра P_m от кривизны поверхности твердого тела выразим формулой Лапласа

$$P_m(T, R) = P_m^0(T) - 2\sigma(T)/R, \quad (24)$$

где σ — коэффициент поверхностного натяжения твердой фазы в газе, $P_m^0(T)$ — параметр, характеризующий

адсорбцию на плоской поверхности твердого тела при температуре T . Также полагаем, что при одинаковой температуре плоской и искривленной поверхностей твердого тела выполняется равенство

$$P_m/\rho_a = P_m^0/\rho_a^0, \quad (25)$$

где ρ_a^0, ρ_a — соответственно средние плотности адсорбированного газа на плоской и искривленной поверхностях, $\rho_a^0 \leq \rho_L, \rho_L$ — плотность сжиженного газа [17].

Температурную зависимость параметра $P_m^0(T)$ представим также как температурную зависимость насыщенных паров [18]

$$P_m^0(T) = P_m^0(T_0) \exp\left(\frac{q}{R_g} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right), \quad (26)$$

где q — усредненная по толщине оболочки удельная энергия адсорбции на единицу киломоля.

Как показано в [16], адсорбированные молекулы имеют различную теплоту адсорбции в зависимости от слоя, в котором они находятся. Поскольку при нагревании среды удаляются молекулы с наименьшей теплотой адсорбции, т.е. с внешних слоев, средняя энергия адсорбции $q = q(T)$ будет зависеть от температуры. Представим

$$q(T) = q_0 \exp(-Q/R_g T^n), \quad (27)$$

где q_0, Q, n — константы, при нахождении которых потребуем, чтобы при температуре кипения материала твердотельной фазы величина q становилась равной энергии сублимации этого материала. В этом случае обеспечивается качественно правильный учет температурной зависимости адсорбции, а именно переход к состоянию, соответствующему полному испарению адсорбируемого газа.

Из выражения (24) следует, что параметр $P_m(T, R)$ при малых радиусах частиц может принимать малые и даже отрицательные значения, т.е. выражение (24) теряет физический смысл. Для более точного нахождения данного параметра требуется учет влияния на коэффициент поверхностного натяжения адсорбированного газа [19], а также для малых радиусов частиц размерного эффекта [20]. Здесь мы исключаем из рассмотрения частицы с $R < 1 \mu\text{m}$, для которых размерный эффект существен.

Как следует из (23), уменьшение $P_m(T, R)$ при малых радиусах частиц влечет увеличение толщины адсорбированной оболочки, что приводит (формула (25)) к уменьшению средней плотности адсорбированного газа. Этот факт отражает основное свойство полимолекулярной адсорбции — одновременную адсорбцию, как на поверхности твердого тела, так и на ранее адсорбированных молекулах. Толстая оболочка адсорбированного газа имеют „рыхлую“ структуру из-за слабой связи адсорбированных на внешних слоях молекул. Ограничивая минимальную среднюю плотность адсорбционной оболочки, можно искусственно учесть фактор влияния

адсорбированного газа на коэффициент поверхностного натяжения. На практике достаточно дополнить выражения (24), (25) условием $\rho \ll \rho_a \ll \rho_a^0$, где ρ — плотность газа при заданном давлении и температуры.

Величина 2δ определяет минимальное расстояние между поверхностями частиц в случае их плотной упаковки, поэтому в случае кубической решетки необходимо заменить постоянную решетки a на $a + 2\delta$, а в случаях ОЦК и ГЦК заменить расстояние b на $b + 2\delta\sqrt{1 + (a/2b)^2}$.

Поскольку адсорбционная оболочка состоит из тех же молекул, что и окружающий газ, будем для нахождения коэффициента теплопроводности этой оболочки применять выражение (2), в котором к величине газового зазора l следует добавить эквивалентную толщину адсорбированного слоя $l_a = \rho_a\delta/\rho$. Таким образом, для учета теплопроводящих свойств адсорбированной оболочки в выражениях (5), (10), (13) следует заменить $\kappa_0(l)$ на $\kappa_0(l_a + l)$.

1.6. Формирование перемычки между сферами в процессе спекания

При достижении температуры плавления твердых частиц порошковой среды начинается процесс плавления сфер. В случае плотной упаковки ($\alpha \geq 0.5$) между соприкасающимися частицами формируется перемычка из расплава, теплопроводность которой близка к теплопроводности твердой фазы. Следствием формирования перемычки будет возрастание эффективной теплопроводности среды.

Спекание соприкасающихся твердых сфер может происходить и без образования жидкой фазы. Как отмечено в работе [21], при высоких температурах возрастает диффузионная подвижность атомов и упругость пара, что приводит к росту площади контакта за счет различных молекулярных механизмов. Поскольку основой механизмов твердотельного спекания является диффузия атомов, то скорость роста площади контакта сфер мала и времена процесса составляют минуты, десятки минут и более [21].

Таким образом, основным механизмом спекания при импульсном воздействии (лазерный синтез, электронная наплавка) с характерной длительностью фазы нагрева и охлаждения в сотни микросекунд является полное или частичное плавление материала.

На тепловой схеме, представленной на рис. 1, с, тепловое сопротивление перемычки \mathcal{R}_f подключается параллельно тепловому сопротивлению газового зазора \mathcal{R}_0 , а на схемах, представленных на рис. 3, с, 4, с, — параллельно \mathcal{R}_0^{AB} .

Найдем тепловое сопротивление перемычки из расплава между двумя сферами, полагая, что коэффициент теплопроводности расплава равен $\kappa_1(T)$. Пусть объемная доля конденсированной фазы в порошковом материале равна $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2$, где α_1, α_2 — соответственно объемные доли твердой фазы и расплава. Обозначим

через $\alpha_f = \alpha_2/\alpha$ объемную долю расплава относительно конденсированной фазы. Тогда объем расплава в одном сферическом включении будет равен $V_f = \alpha_f V_R$, где V_R — объем сферической частицы радиуса R . Полагаем, что плавление твердотельных частиц начинается с их поверхности и расплав за счет капиллярных сил образует перемычку между контактирующими сферами.

Для определения радиуса перемычки необходимо учесть количество контактов, приходящихся на сферу, которое определяет расход расплава на формирование одной перемычки. В ячейке с кубической симметрией количество контактов одной сферы с соседями равно 6. Следовательно, полный объем расплава, приходящийся на образование одной перемычки между сферами, составляет $V'_f = V_f/3$, а соответствующая объемная доля $\alpha'_f = \alpha_f/3$. В ячейке с ОЦК-симметрией количество контактов у одной сферы составляет 8 и $V'_f = V_f/4$, а $\alpha'_f = \alpha_f/4$. В ячейке с ГЦК-симметрией находятся в контакте сферы, находящиеся в узле, со сферами, принадлежащими граням ячейки. Количество контактов у сферы, находящейся в узле, составляет 12, а у сферы, принадлежащей грани, — 4. В итоге на образование перемычки между двумя сферами в ячейке с ГЦК-симметрией объем расплава составляет $V'_f = V_f/3$ и $\alpha'_f = \alpha_f/3$.

Уравнение для нахождения радиуса перемычки r_f следует из выражения для объема расплава

$$V'_f = 2\pi \int_0^{r_f} (a - 2\sqrt{R^2 - r^2}) r dr. \quad (28)$$

Тепловую проводимость перемычки определим как произведение тепловой проводимости двух полусфер (4) на долю поперечного сечения перемычки в промежутке между сферами:

$$1/\mathcal{R}_f \approx r_f^2/(R^2\mathcal{R}_1) = \pi\kappa_1(T)r_f^2/R. \quad (29)$$

Для расчета радиуса перемычки между контактирующими сферами в случае, соответствующем геометрии, представленной на рис. 3, следует в выражении (28) расстояние a заменить на $a' = \sqrt{0.25a^2 + b^2}$.

Образование перемычек приводит к формированию сотовой структуры спекаемого порошка, и строгий расчет ЭКТ такой среды существенно усложняется. По мере плавления сфер и роста объема перемычек происходит „таяние“ контактирующих сфер, что приводит к уменьшению ЭКТ за счет увеличения тепловых сопротивлений \mathcal{R}_1 (4) и соответственно $\mathcal{R}_1^A, \mathcal{R}_1^B, \mathcal{R}_1^C$. С другой стороны, растет объем перемычек в перпендикулярных направлениях по отношению к рассматриваемому, что влечет увеличение ЭКТ. Учитывая сказанное, ограничимся здесь лишь учетом подключения теплового сопротивления перемычки \mathcal{R}_f параллельно тепловому сопротивлению соответствующего газового зазора.

Если в порошковой среде частицы находятся далеко друг от друга ($\alpha < 0.25$), то слияние частиц возможно

Эмпирические константы адсорбции

$T_0 = 300 \text{ K}$	He ($\Delta = 0.9$)		Ar ($\Delta = 0.55$)		N ₂ ($\Delta = 0.50$)	
	P_m^0 , КПа	ρ_a^0 , (kg/m ³)	P_m^0 , КПа	ρ_a^0 , (kg/cm ³)	P_m^0 , КПа	ρ_a^0 , (kg/cm ³)
U	40	40	130	1200	130	808
MgO	29	40				

лишь при их случайном сближении. В данной модели такие процессы не рассматриваются. Эффективная теплопроводность при малых объемных долях частиц с расплавом вычисляется, как и для твердотельных частиц.

1.7. Теплопроводность расплава с газовыми включениями

В случае полного плавления сфер ($\alpha_f = 1$) образуется гетерогенная бесструктурная среда из расплава с газовыми пузырями различных размеров и конфигураций. Для расчета ЭКТ такой среды будем искать тепловое сопротивление объема $a \times a \times a$, в котором α — объемная доля конденсированной фазы (расплава) и $\alpha_0 = 1 - \alpha$ — объемная доля газовой фазы. Эквивалентную тепловую схему расплава с газовыми включениями представим в виде параллельного соединения теплового сопротивления не перекрытой газовыми включениями конденсированной фазы \mathcal{R}'_1 и последовательно включенных тепловых сопротивлений газовой фазы \mathcal{R}_0 и теплового сопротивления конденсированной фазы \mathcal{R}_1 , перекрытой газовыми включениями. Соответствующая этой эквивалентной схеме модель гетерогенной среды содержит газовый объем, который представим в виде цилиндра высотой l_0 и площадью основания S_0 . Угол между направлением теплового потока и осью цилиндра равен ϑ . Объем газовой полости $V_0 = S_0 l_0 = \alpha_0 a^3$. Отсюда следует, что $\alpha_0 = \beta_0 \gamma_0 = \beta \gamma$ где $\beta_0 = l_0/a$, $\gamma_0 = S_0/a^2$, $\beta = \beta_0 \cos \vartheta$, $\gamma = \gamma_0 / \cos \vartheta$ — доля площади грани рассматриваемого объема, перекрываемая газовым включением. Доля площади грани рассматриваемого объема, приходящейся на конденсированную фазу, равна $1 - \gamma$. Тепловые сопротивления элементов эквивалентной схемы имеют вид

$$\mathcal{R}_0 = \beta^2 / \alpha_0 \kappa_0 a, \quad \mathcal{R}_1 = \beta(1 - \beta) / \alpha_0 \kappa_1 a, \\ \mathcal{R}'_1 = 1 / \kappa_1 a(1 - \gamma). \quad (30)$$

Из выражений (30) можно получить суммарное тепловое сопротивление рассматриваемой здесь эквивалентной схемы и найти ЭКТ расплава с заданным газовым включением

$$\kappa_{\text{eff}}(\cos \vartheta, \beta_0) = \kappa_1 \left(1 - \frac{\alpha_0}{\beta_0 \cos \vartheta} \right) + \frac{\alpha_0 \kappa_0}{(1 - \kappa_0 / \kappa_1) \beta_0^2 \cos^2 \vartheta + \beta_0 \cos \vartheta \kappa_0 / \kappa_1}, \quad (31)$$

где $\alpha_0 / \beta_0 \leq \cos \vartheta \leq 1$, $\alpha_0 \leq \beta_0 \leq 1$.

Отметим, что формула (31) для случаев $\cos \vartheta = \alpha_0 / \beta_0$ и $\cos \vartheta = 1$, $\beta_0 = 1$ переходит соответственно в выражения для эффективных теплопроводностей для слоистой и параллельной моделей [22].

Для усреднения эффективной теплопроводности по всем ориентациям газовой полости требуется вычислить интеграл

$$\langle \kappa_{\text{eff}}(\beta_0) \rangle = \int_{\alpha_0 / \beta_0}^1 \kappa_{\text{eff}}(\cos \vartheta, \beta_0) d \cos \vartheta / (1 - \alpha_0 / \beta_0). \quad (32)$$

Полагая, что размер газовой полости β_0 случайная величина, равномерно распределенная в интервале $\alpha_0 \leq \beta_0 \leq 1$, найдем эффективную теплопроводность, усредненную по размерам газовой полости:

$$\langle \langle \kappa_{\text{eff}} \rangle \rangle = \frac{1}{\alpha_0} \int_{\alpha_0}^1 \langle \kappa_{\text{eff}}(\beta_0) \rangle d\beta_0. \quad (33)$$

Интеграл (32) от функции (31) вычисляется аналитически, (33) находится численно.

2. Численные исследования эффективной теплопроводности порошковых сред

2.1. Эмпирические константы

На данном этапе единственным способом нахождения входящих в (23), (25), (27) величин, характеризующих адсорбцию, является сопоставление результатов расчетов с экспериментом. В таблице приводятся эмпирические константы, найденные по экспериментальным данным [4,5,23].

Для всех размеров частиц согласие с экспериментом достигается при задании композиции типов элементарных ячеек „кубическая + ГЦК“ в соотношении, вычисленном по формулам (19), (20).

Нетрудно убедиться, что зависимость Δ от диаметра молекул газовой атмосферы носит линейный характер и показатель степени в уравнении (23) однозначно определяется сортом газовой атмосферы. Зависимость ЭКТ от давления при $T_0 = 300 \text{ K}$ для всех размеров частиц определяется только двумя параметрами P_m^0 и ρ_a^0 . Заметим, что для тяжелых газов (Ar, N₂) параметр ρ_a^0 близок к плотности сжиженного газа, для легкого газа (He) ρ_a^0 составляет ~ 0.3 от плотности сжиженного газа.

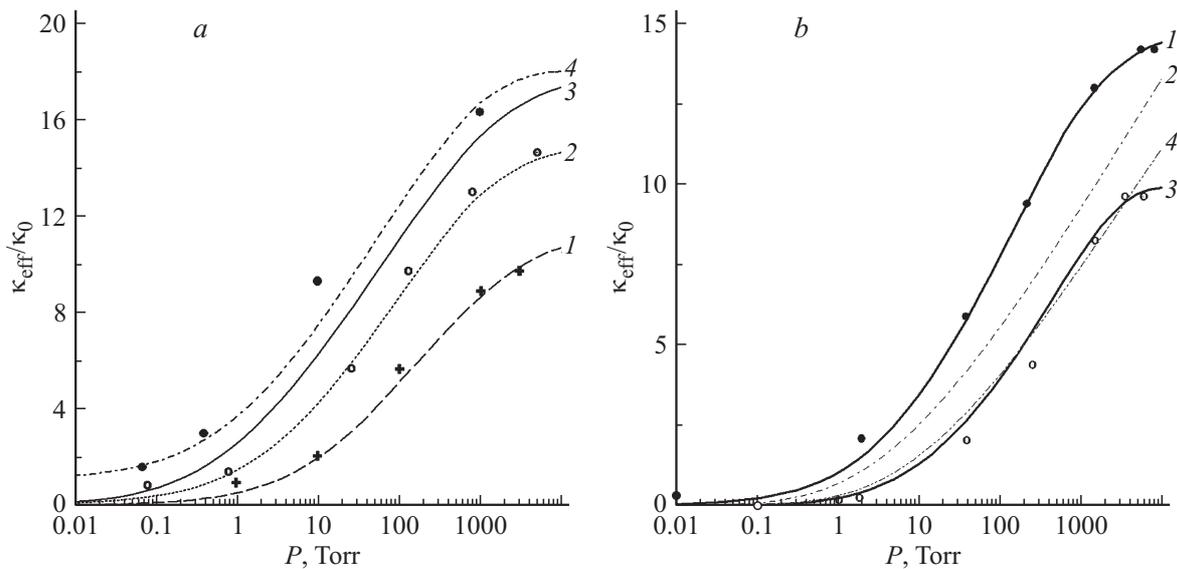


Рис. 5. Зависимость ЭКТ (в единицах теплопроводности газа) для упакованных слоев урановых сферических частиц с объемной долей $\alpha = 0.6$ при $T = 300$ К в газе от давления: *a* — $U + N_2$ ($D = 53 \mu\text{m}$ — 1, $D = 190 \mu\text{m}$ — 2, $D = 1 \text{mm}$ — 3, с тепловым контактом — 4); *b* — $D = 190 \mu\text{m}$ ($U + \text{Ar}$ — 1, без адсорбции — 2, $U + \text{He}$ — 3, без адсорбции — 4). Маркеры — эксперимент [5]. Коэффициенты теплопроводности в $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$: уран — 28, азот — 0.0257, аргон — 0.0177, гелий — 0.152.

Приведенные в работах [4,23] экспериментальные данные эффективной теплопроводности керамик при высоких температурах (> 300 К) позволили найти константы, определяющие температурную зависимость средней энергии адсорбции (27). Для MgO в атмосфере гелия имеем $q_0 = 545 \text{ KJ/mol}$, $Q = 6.76 \text{ KJ/mol}$, $n = 4$. Отметим, что q_0 близка к энергии сублимации [17].

2.2. Сравнение с экспериментом. Температурные зависимости ЭКТ

Все представленные ниже расчеты и сравнения с результатами эксперимента выполнены с использованием данных, приведенных в таблице.

В работе [5] приводятся экспериментальные значения ЭКТ, полученные для упакованных слоев урановых сфер в различных газовых средах при комнатной температуре. Измерения проводились для упаковок с различными диаметрами сфер. Представленные на рис. 5 сравнения расчетных и экспериментальных данных демонстрируют удовлетворительное согласие. Наихудшее согласие наблюдается для сферических частиц большого (1 mm) диаметра. У частиц с большим диаметром можно допустить наличие теплового контакта конечного размера, например из-за отклонения ее геометрии от сферической. В случае, если радиус контакта составляет ~ 0.02 от радиуса частицы, получаем хорошее согласие результатов расчета и эксперимента.

Как следует из рис. 5, *b*, пренебрежение адсорбцией, во-первых, приводит к монотонному росту эффективной теплопроводности при увеличении давления, что наблюдается в работах [9,24]. Во-вторых, расчет дает заниженное значение эффективной теплопроводности в сравнении с экспериментом. Отметим, что роль адсорбции в

среде гелия проявляется лишь при высоких давлениях, в то время как в среде аргона роль адсорбции велика при любых давлениях. Этот результат нетрудно объяснить, если принять во внимание динамический характер адсорбции [16]. Действительно, флуктуации тепловой энергии поверхности твердого тела с большей вероятностью приводят к десорбции легких молекул, чем тяжелых. Таким образом, природа выхода на насыщение ЭКТ при высоких давлениях обусловлена ограниченностью роста адсорбционной оболочки.

Также хорошее согласие расчетных зависимостей ЭКТ от давления с экспериментальными [4,23] было получено и для более высоких температур порошковых сред. Отметим здесь тот факт, что при температуре среды 573 К результаты расчетов ЭКТ с учетом и без учета адсорбции согласуются с экспериментом [23], что свидетельствует о практически полном испарении адсорбционной оболочки.

Представленные сравнения результатов расчетов и экспериментов позволяют сделать вывод, что разработанный здесь метод расчета ЭКТ правильно учитывает все основные процессы, ответственные за формирование теплопроводящих свойств порошковых материалов с размерами частиц, превышающими $1 \mu\text{m}$.

Температурная зависимость ЭКТ порошковых сред определяется температурной зависимостью коэффициентов теплопроводности компонент и температурной зависимостью адсорбции. Температурные зависимости теплопроводности твердотельной фазы порошковой среды можно найти, например, из [17], температурные зависимости для газовой компоненты — по данным [25]. Численные исследования показали, что в случае изобарического нагрева порошковой среды до температуры

порядка 400–500 К эффективная теплопроводность начинает быстро возрастать, главным образом, из-за увеличения теплопроводности газовой атмосферы, включая адсорбционную оболочку. По мере нагревания среды адсорбционная оболочка разрушается, что приводит к некоторому уменьшению теплопроводности порошкового материала, но далее ЭКТ продолжает увеличиваться с ростом температуры.

При достижении температуры плавления твердых частиц порошковой среды начинается процесс плавления сфер. Результаты численных исследований зависимости ЭКТ порошковой среды с различными долями конденсированной фазы α от объемной доли расплавленного материала α_f представлены на рис. 6. Видно, что ЭКТ увеличивается с увеличением объемной доли расплава и достигает максимума при $\alpha_f = 0.2–0.3$, причем положение максимума зависит от объемной доли конденсированной фазы. Рост теплопроводности с увеличением объемной доли расплава обусловлен увеличением теплопроводности перемычки за счет увеличения ее радиуса. Дальнейшее увеличение доли расплава приводит к уменьшению радиуса твердотельного остатка сфер и, как следствие, к увеличению теплового сопротивления образовавшейся структуры.

Примечательно, что при полном плавлении материала порошковой среды эффективная теплопроводность расплава слабо зависит от начальных размеров сфер, даже если не учитывать движение расплава за счет различных факторов, например, силы тяжести. Вследствие перемешивания расплава при его большой доле ($\alpha_f > 0.9$), ЭКТ должен зависеть только от объемной доли конденсированной фазы и не зависеть от начальных размеров частиц. Таким образом, для описания ЭКТ

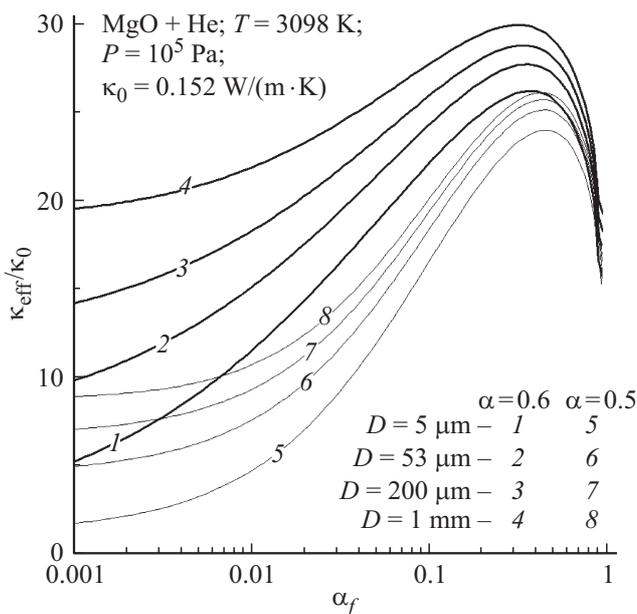


Рис. 6. Зависимость ЭКТ в единицах κ_0 от объемной доли расплава керамических сферических частиц различных размеров для различных объемных долей конденсированной фазы.

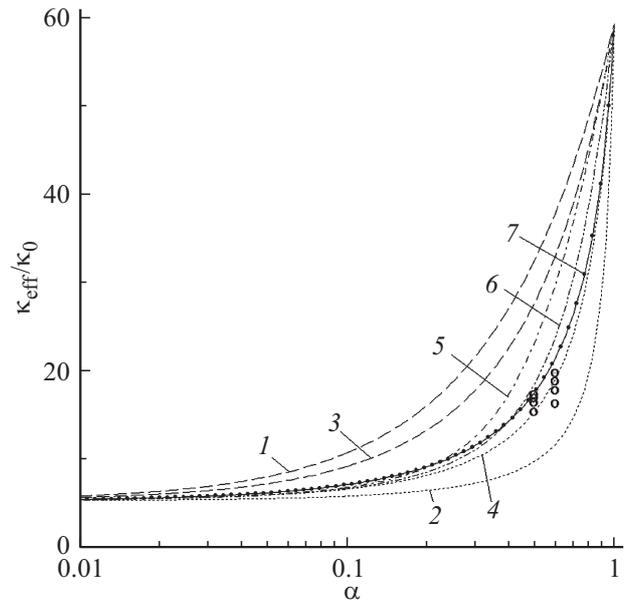


Рис. 7. Сравнение зависимостей эффективной теплопроводности расплава MgO + He при температуре 3098 К и давлении 10^5 Pa от объемной доли конденсированной фазы, рассчитанных по различным моделям: „параллельная модель“ — 1, „слоистая модель“ — 2, модель Максвелла–Эйкена 1 (дисперсная фаза He) — 3, модель Максвелла–Эйкена 2 (дисперсная фаза MgO) — 4, модель эффективной среды (EMT) — 5, модель [11] — 6, формула (33) 7, маркеры о — данные расчета из рис. 6 при $\alpha_f \approx 1$. Коэффициенты теплопроводности в $\text{W/(m} \cdot \text{K)}$: MgO — 9; гелий — 0.796, $\kappa_0 = 0.152$.

расплава с газовыми включениями можно применять бесструктурные модели теплопроводности.

Для выбора наиболее адекватной данному случаю модели эффективной теплопроводности на рис. 7 приведены зависимости ЭКТ от объемной доли конденсированной фазы, рассчитанные для различных моделей по формулам, приведенным в [11,22].

Из указанного рисунка следует, что в данном примере для расчета эффективной теплопроводности полностью расплавленной порошковой среды может применяться как модель Максвелла–Эйкена 2, в которой газовая фаза является основной, так и описанная в настоящей работе модель расплава с газовыми включениями.

Заключение

Разработана и реализована модель для расчета эффективной теплопроводности порошковых материалов для различных термодинамических состояний среды. В данной модели учтен структурный фактор порошкового материала (размеры сфер и их взаимное расположение). Теплообмен через газовый зазор учитывает зависимость коэффициента теплопроводности газа от соотношения величины зазора и длины свободного пробега молекул. В модели учтен вклад в теплопроводность полимолекулярной адсорбции газа на поверхности конденсирован-

ной фазы с учетом ее кривизны, а также температурные зависимости коэффициентов теплопроводности твердотельной и газовой фаз. В случае плавления сфер, учтено образование теплового контакта за счет расплава.

Показано, что при комнатной температуре адсорбция газа на поверхности твердых сфер оказывает существенное влияние на формирование теплопроводящих свойств порошковых сред. Природа выхода на насыщение ЭКТ при высоких давлениях обусловлена ограниченностью роста адсорбционной оболочки. При возрастании температуры среды происходит уменьшение роли адсорбции в формировании теплопроводящих свойств порошковых материалов вследствие разрушения адсорбционной оболочки.

Показано, что в случае полного плавления порошковой среды для расчета эффективной теплопроводности расплава могут применяться бесструктурные модели теплопроводности гетерогенных сред. Численные исследования показали, что ЭКТ, полученные по предложенным здесь структурной и бесструктурной моделям, согласуются.

Результаты вычислений хорошо согласуются с экспериментальными данными различных авторов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-08-00037) и финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (научно-исследовательская работа ФГБОУ ВПО „ЮУрГУ“ (НИУ), проводимая в рамках государственного задания № 1030 (№ 2014105-ГЗ).

Список литературы

- [1] *Gusarov A.V., Laoui T., Froyen L., Titov V.I.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 2003. Vol. 46. P. 1103–1109.
- [2] *Шишковский И.В.* Лазерный синтез функционально-градиентных мезоструктур и объемных изделий. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. 424 с.
- [3] *Gnyusov S.F., Tarasov S.Yu.* // Surface & Coatings Technology. 2013. Vol. 232. P. 775–783.
- [4] *Deissler R.G., Boegli J.S.* // Trans. ASME. 1958. Vol. 80. P. 1417–1425.
- [5] *Swift D.L.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 1966. Vol. 9. P. 1061–1074.
- [6] *Luikov A.V., Shashkov A.G., Vasiliev L.L., Fraiman Yu.E.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 1968. Vol. 11. P.117–140.
- [7] *Hadley G.R.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 1986. Vol. 29. P. 909–920.
- [8] *Shonnard D.R., Whitaker S.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 1989. Vol. 32. P. 503–512.
- [9] *Gusarov A.V., Kovalev E.P.* // Phys. Rev. 2009. Vol. 80. P. 024 202.
- [10] *Гусаров А.В., Ковалев Е.П.* // ФХОМ. 2009. № 1. С. 70–82.
- [11] *Bruggeman D.A.G.* // Ann. Phys. 1935. Vol. 24. P. 636–664.
- [12] *Bottcher C.J.F.* // Theory of Electric Polarization. Elsevier, Houston, 1952. P. 415–420.
- [13] *Landauer R.* // J. Appl. Phys. 1952. Vol. 23. P. 779–784.
- [14] *Maxwell J.C.* A Treatise on Electricity and Magnetism. Third ed. Dover Publications Inc. New York, reprinted 1954 (Chapter 9).
- [15] *Bu-Xuan Wang, Le-Ping Zhou, Xiao-Feng Peng.* // Int. J. of Heat and Mass Transfer. 2003. Vol. 46. P. 2665–2672.
- [16] *Карнаухов А.П.* Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов. Новосибирск: Наука, 1999. 470 с.
- [17] *Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мелихова.* М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
- [18] *Сивухин Д.В.* Общий курс физики. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Наука, 1979. 552 с.
- [19] *Калажиков Х.Х., Калажиков З.Х., Хоконев Х.Б.* // ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 2. С. 141–142.
- [20] *Оно С., Кондо С.* Молекулярная теория поверхностного натяжения / М.: Изд-во иностр. лит. 1963. С. 290.
- [21] *Гегузин Я.Е.* Физика спекания. М.: Наука. 1967. 360 с.
- [22] *Wang J., Carson J.K., North M.F., Cleland D.J.* // Int. J. of Heat and Mass Transfer. 2006. Vol. 49. P. 3075–3083.
- [23] *Slavin A.J., Londry F.A., Harrison J.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 2000. Vol. 43. P. 2059–2073.
- [24] *Гусаров А.В., Ковалев Е.П.* // ФХОМ. 2009. № 2. С. 66–71.
- [25] *Варгафтик Н.Б., Филиппов А.П., Тарзиманов А.А., Тоцкий Е.Е.* Справочник по теплопроводности жидкостей и газов. М.: Энергоатомиздат, 1990. 352 с.