

величина Q хорошо совпадает с приводимой в работе [8] Q суммарно-экзотермической реакции в реакционном слое конденсированной фазы при горении. Так, например, в наших опытах при $p = 0,05$ МПа и $T_{\text{кип}} = 284$ °С $Q = 55$ Дж/г, а по данным [8] при $p = 2$ МПа и $T_{\text{кип}} = 380$ °С $Q = 63$ Дж/г. Кроме того, определенное по данным работ [7, 8] значение \dot{q} в реакционном слое стационарно горящего гексогена при повышенных давлениях (массовая скорость горения $u_m = 0,94$ г/(см² · с), $p = 2,5$ МПа, $T = 452$ °С) и начальная удельная скорость тепловыделения ($\dot{q} = 62,3$ Вт/г, $p = 0,05$ МПа, $T = 291$ °С, $T = 50$ К/с) удовлетворительно ложатся на прямую в координатах $\lg \dot{q}$, $1/T$ с кинетическими параметрами $k_0 = 18,5$ с⁻¹, $E = 199,5$ кДж/моль, определяющими кинетику разложения гексогена в расплаве [9]. Эти обстоятельства указывают на то, что механизм термического разложения гексогена в жидкой фазе при $T \geq T_{\text{кип}}$ с ростом давления остается неизменным. Очевидно, в условиях интенсивного массообмена при кипении гексогена не происходит заметного накопления автокатализатора в жидкой фазе, и увеличение давления в условиях горения не приводит к ускорению реакции и уменьшению энергии активации за счет автокатализатора, как это наблюдалось, например, в [2]. При скоростях нагрева, меньших скорости распространения тепловой волны при горении, и повышенных давлениях, прежде чем будет достигнута температура кипения (при $p = 0,1$ МПа, $T_{\text{кип}} = 340$ °С), реакция успевает пройти на значительную глубину, за это время концентрация автокатализатора успевает значительно возрасти и соответственно ускоряется ход процесса разложения, что наблюдалось в [2] и настоящих опытах.

Сопоставляя результаты опытов по осаждению паров гексогена с термографическими измерениями, можно сделать вывод о том, что в исследованном интервале скоростей нагрева и $p > 0,35$ МПа изменением в макрокинетике распада гексогена, обусловленным испарением, можно пренебречь и считать, что в этих условиях гексоген ведет себя как малолетучее ВВ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мержанов А. Г., Слуцкер Б. М., Штейнберг А. С. ФГВ, 1968, 4, 4, 540.
2. Штейнберг А. С., Слуцкер Б. М., Мержанов А. Г. ФГВ, 1970, 5, 4, 464.
3. Александров В. В., Буфетов Н. С. и др. ФГВ, 1973, 9, 1, 75.
4. Rogers R. N. *Thermochimica Acta*, 1972, 3, 437.
5. Борисов В. П., Лаптевков Б. К., Григорьев Ю. М. ФГВ, 1987, 23, 4, 56.
6. Hall P. G. // *Transactions of the Faraday Soc.*, 1971, 67, 578, 556.
7. Андреев К. К. Термическое разложение и горение взрывчатых веществ.— М.: Наука, 1966.
8. Мальцев В. М., Похил П. Ф. ПМТФ, 1963, 2, 173.
9. Robertson A. J. B. // *Transactions of the Faraday Soc.*, 1945, 45, 85.

Поступила в редакцию 18/1 1988,
после доработки — 25/V 1988

УДК 536.46

РАСЧЕТ КООРДИНАЦИОННОГО ЧИСЛА ЧАСТИЦ МЕТАЛЛА В СМЕСЕВЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

В. А. Вальцифер, А. Е. Степанов
(Пермь)

Известно [1], что при горении металлического горючего в смесевых системах происходит его агломерация. Ранее при статистическом рассмотрении упаковки дисперсных компонентов в смесевых композициях предложено использовать в качестве параметра, характеризующего влияние

гетерогенной структуры смесевой композиции на агломерацию, координационное число металла N , т. е. среднее число контактов частиц металла, приходящихся на одну частицу [1—3]. Это обусловлено тем, что взаимное расположение частиц металла в композите оказывает существенное влияние на его агломерацию в процессе горения. Контакт между частицами металла — необходимое условие их слияния при прохождении волны горения через конденсированное вещество [1]. Координационное число частиц металла в исходном композите характеризует его предрасположенность к образованию агломератов при горении. В работе [1] предложен метод расчета координационного числа для пары монофракция металла — связующее при малом объемном наполнении.

Цель данной работы — разработка метода расчета координационного числа частиц металла в смеси с различными реальными фракциями окислителя при предельных степенях наполнения композита. Метод разработан на основе развития идеи [4, 5] о моделировании заполнения пространства симплексами, состоящими из четырех контактирующих частиц. В вершинах симплексов находятся центры шаров — частиц, длина ребер определяется размерами частиц. В расчете применены комбинаторный метод и вероятностный подход к рассмотрению структуры композита. Пространство системы разбивается на совокупность симплексов, число вариантов которых определяется общим числом фракций. Рассчитывая вероятность существования каждого типа симплексов, находим свободный объем систем, число точек контактов частиц каждой фракции между собой и между частицами других фракций, а также суммарное число точек контакта в единице объема и координационное число каждой фракции композита. Расчет позволяет определить данные геометрические параметры хаотической структуры композита, наполненного частицами различных размеров и форм, а также оптимизировать фракционный состав дисперсных компонентов.

Практическая реализация метода осуществлена на ЭВМ БЭСМ-6 на языке АЛГОЛ-ГДР. Проведены расчеты для смесевой композиции с предельной объемной степенью наполнения (т. е. с наполнением, когда толщина прослойки связующего между частицами пренебрежимо мала) фракцией металлического горючего с размером частиц $r = 15$ мкм и двумя фракциями окислителя с $r = 25$ и 4 мкм. Из рис. 1 следует, что увеличение относительной объемной доли металла $\varphi_{\text{мет}}$ приводит к однозначному возрастанию N . Наиболее сильное влияние соотношения объемных долей фракций окислителя на координационное число металла проявляется при содержании металла в композиции менее 50 %. При этом, минимальная величина N и, следовательно, минимальная геометрическая предрасположенность металла к агломерации соответствуют максимальному содержанию мелкодисперсной фракции в окислителе.

Проведены расчеты (рис. 2) для смесевой композиции наполненной фракцией окислителя с $r = 200$ мкм и металлическим горючим различной дисперсности. Из рис. 2 следует, что разбавление фракции металла крупнодисперсным окислителем приводит к уменьшению координационного числа частиц металла. При этом эффективность разбавления крупнодисперсного металлического горючего значительно больше, чем мелкодисперсного, а при существенном различии в размерах частиц ($r = 15$ мкм) упаковка частиц смеси окислителя с металлическим горючим практически не влияет на N . Последнее объясняется нахождением частиц металла в «карманах» между крупными частицами окислителя. В этом случае существенное влияние на агломерацию оказывает объем «кармана», а не координационное число (см. рис. 2, 1). Результаты, приведенные на рис. 2, могут быть распространены и на фракции окислителя с другим размером частиц при сохранении отношения размеров частиц фракций окислителя и металла.

Таким образом, разработан метод, позволяющий проводить расчет координационного числа частиц металла в высоконаполненных полидисперсными компонентами композитах. Проведенные расчеты для систем

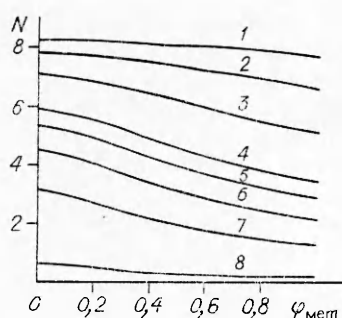


Рис. 1. Зависимость N от объемной доли мелкой фракции в смеси окислителя $\varphi_{\text{мет}}$. Соотношение объемных долей металл/окислитель: 1 — 10, 2 — 5, 3 — 2,5, 4 — 1,25, 5 — 0,95, 6 — 0,65, 7 — 0,35, 8 — 0,05.

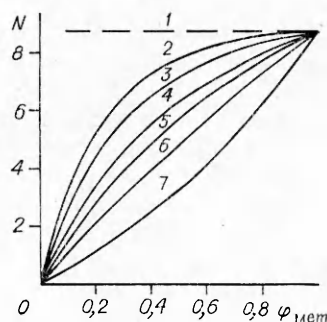


Рис. 2. Зависимость $N(\varphi_{\text{мет}})$ в смеси с крупнодисперсным окислителем (200 мкм). Размер частиц металла: r , мкм: 1 — 15, 2 — 35, 3 — 50, 4 — 75, 5 — 100, 6 — 150, 7 — 500.

с заданным соотношением металл/окислитель показали эффективность применения мелкодисперсных фракций окислителя для уменьшения величины N .

ЛИТЕРАТУРА

1. Григорьев В. Г., Куценогий К. П., Зарко В. Е. ФГВ, 1981, 17, 4, 9.
2. Григорьев В. Г., Зарко В. Е., Куценогий К. П. и др. Докл. АН СССР, 1981, 259, 4, 881.
3. Haller W. J. Chem. Phys., 1965, 42, 2, 686.
4. Роджерс К. Укладки и покрытия. — М.: Мир, 1968.
5. Dodds J. A. J. Colloid and Interface Sci., 1980, 77, 2, 317.

Поступила в редакцию 29/X 1987,
после доработки — 1/IV 1988

УДК 532.517.2 : 5.41.12 : 536.24

СТРУЙНОЕ ПЕРЕМЕШИВАНИЕ РЕАГЕНТОВ В ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ

А. В. Солдаткин
(Ленинград)

В теории химических реакторов существуют две полярные модели: реактор идеального смешения и идеального вытеснения [1]. Существенный недостаток обеих моделей — они не указывают физического механизма, приведшего к ситуации идеального смешения или вытеснения при реальном химическом процессе. Модель струйного реактора свободна от указанного выше недостатка: процесс смешения реагирующей смеси обусловлен эжекцией окружающей среды. В работах [2—5] проводится математическое моделирование течения и тепломассопереноса в трубчатых реакторах с учетом формирования профиля течения на начальном участке трубы.

В химической технологии часто используются струйные течения для обеспечения интенсификации процесса и уменьшения габаритных характеристик реактора. Струйные течения реагирующей обобщенной ньютоновской жидкости (модель полимеров, концентрированной суспензии и т. д.) в ограниченном пространстве, насколько известно автору, не рассматривались. Постановка задачи о струйном течении в рамках теории пограничного слоя обуславливает постоянство импульса струи смеси вдоль оси реактора в отличие от постоянства расхода при течении в трубе [2].