

# Новый Афон 2012

2 - 11 августа



10-й Российский симпозиум

## Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах

Тезисы докладов

ОТДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИКИ, МАШИНОСТРОЕНИЯ, МЕХАНИКИ  
И ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ РАН  
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РАН  
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ  
10-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

**«ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ УЛЬТРАКОРОТКИХ ПРОЦЕССОВ В  
СИЛЬНОНЕРАВНОВЕСНЫХ СРЕДАХ»**

В сборнике представлены тезисы докладов 10-го Российского симпозиума «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Новый Афон, 2 августа - 11 августа 2012 г.) Доклады отражают современное состояние исследований в следующих областях: прочность и пластичность твёрдых тел при высокоскоростной деформации, метастабильные состояния и их распад, ударные и детонационные волны, релаксация, химические реакции за фронтом ударной волны, пылевая плазма, взаимодействие мощных ионных, электронных и лазерных пучков с веществом, биофизика и биохимия ультракоротких процессов, ультракороткие процессы на поверхности, научные основы нанотехнологий. Рассмотрены экспериментальные исследования, теория и атомистическое моделирование релаксации и динамических процессов.

Специфика Симпозиума предполагает рассмотрение, в первую очередь, экспериментальных и теоретических работ, которые анализируют динамику процессов в конденсированном веществе на молекулярном уровне и/или связывают мезо- и макроскопические подходы с молекулярными процессами.

Под редакцией

Нормана Г. Э., Савинцева А. П., Стегайлова В. В., Тимофеева А. В.

**ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

Фортов В.Е., сопредседатель, Президиум РАН, ОИВТ РАН, Москва  
Карамурзов Б.С., сопредседатель, КБГУ, Нальчик  
Норман Г.Э., зам. председателя, ОИВТ РАН, Москва  
Савинцев А.П., зам. председателя, КБГУ, Нальчик  
Стегайлов В.В., учёный секретарь, ОИВТ РАН, Москва  
Тимофеев А.В., учёный секретарь, ОИВТ РАН, Москва

Веб-сайт Симпозиума  
<http://www.ihed.ras.ru/afon12>

## ОГЛАВЛЕНИЕ

### СЕКЦИЯ 1. ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ ТВЁРДЫХ ТЕЛ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

<u>Жиляев П.А., Стегайлов В.В.</u> Ab initio молекулярная динамика: перспективы использования многопроцессорных и гибридных супер-эвм . . . . .	5
<u>Красюк И.К., Пашилин П.П., Семенов А.Ю., Стучебрюхов И.А., Хищенко К.В.</u> Особенности использования лазерного интерферометра и применимости акустического приближения при изучении ударно-волновых откольных явлений . . . . .	5
<u>Стучебрюхов И.А., Абросимов С.А., Бажулин А.П., Красюк И.К., Пашилин П.П., Семенов А.Ю., Хищенко К.В.</u> Экспериментальное исследование механических свойств вещества в области отрицательных давлений, создаваемых действием лазерного импульса пикосекундной длительности . . . . .	6
<u>Орехов Н.Д., Стегайлов В.В.</u> Атомистическое моделирование плавления графита . . . . .	6
<u>Груздков А.А., Петров Ю.В.</u> Выделение масштабных уровней при разрушении твердых тел . . . . .	7

### СЕКЦИЯ 2. МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ИХ РАСПАД

<u>Чирков П.В., Мирзоев А.А.</u> Молекулярно-динамическое моделирование тетрагонального искажения мартенсита железо-углеродных сплавов . . . . .	8
<u>Писарев В.В.</u> Кинетика образования кристаллических зародышей в переохлажденном расплаве по данным молекулярной динамики . . . . .	8
<u>Смирнов Г.С.</u> Атомистическое моделирование газовых гидратов . . . . .	8
<u>Колотова Л.Н., Норман Г.Э., Писарев В.В.</u> Молекулярно-динамическое моделирование стеклования переохлажденного расплава алюминия . . . . .	9

### СЕКЦИЯ 3. УДАРНЫЕ И ДЕТОНАЦИОННЫЕ ВОЛНЫ, РЕЛАКСАЦИЯ, ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ ЗА ФРОНТОМ УДАРНОЙ ВОЛНЫ

<u>Шумова В.В., Зиборов В.С., Ефремов В.П.</u> Процессы ионизации и разделение зарядов во фронте ударной волны в смеси гелия с малой примесью тяжелых молекул . . . . .	10
<u>Хищенко К.В., Бордзиловский С.А., Караханов С.М.</u> Измерение и расчет температуры эпоксидной смолы при ударно-волновом нагружении . . . . .	10
<u>Валуев И.А., Казеев Н.А., Морозов И.В.</u> Молекулярная динамика с расщепленными волновыми пакетами: использование переменного шага по времени . . . . .	10

### СЕКЦИЯ 4. НЕРАВНОВЕСНАЯ ПЛАЗМА, ВОЛНЫ ИОНИЗАЦИИ, ПРОБОЙ В ГАЗАХ

<u>Тимофеев А.В.</u> Применение термодинамики для пылевой плазмы . . . . .	12
<u>Орешкин В.И., Чайковский С.А.</u> Динамика перетяжки в х-пинчах . . . . .	12
<u>Бобарькина Т.А., Малов А.Н., Оришнич А.М., Чиркашенко В.Ф., Яковлев В.И.</u> Исследование импульсно-периодического газового разряда в сверхзвуковом воздушном потоке: волновая структура следа . . . . .	12
<u>Поляков Д.Н., Василяк Л.М., Шумова В.В.</u> Положительный столб тлеющего разряда в неоне с микрочастицами . . . . .	13
<u>Ланкин А.В., Норман Г.Э.</u> Рекомбинация в плотной ионной плазме . . . . .	13
<u>Шиплюк А.Н.</u> Экспериментальные исследования высокочастотных волн в гиперзвуковых пограничных слоях . . . . .	14

### СЕКЦИЯ 5. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ

<u>Жиляев П.А., Стегайлов В.В.</u> Первопринципные расчеты коэффициента теплопроводности металлов с горячими электронами . . . . .	15
<u>Савинцев А.П., Гавашели Ю.О.</u> Расчет высоких давлений, создаваемых в кристаллах каменной соли ультракороткими лазерными импульсами . . . . .	15

### СЕКЦИЯ 6. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЩНЫХ ИОННЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ С ВЕЩЕСТВОМ

<u>Ромашевский С.А., Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Овчинников А.В., Петровский В.П., Чефонов О.В.</u> Генерация жесткого рентгеновского излучения с помощью фемтосекундных лазерных импульсов . . . . .	16
<u>Жиляев П.А., Норман Г.Э., Саитов И.М., Стариков С.В., Стегайлов В.В.</u> Атомистическое моделирование наномодификации поверхности металла пикосекундным лазерным импульсом . . . . .	16
<u>Смирнова Д.Е.</u> Исследование диффузии компонентов топливных сплавов уран-молибден методами атомистического моделирования . . . . .	17
<u>Князев Д.В., Левашов П.Р.</u> Первопринципный расчет переносных свойств алюминия . . . . .	17
<u>Вервигишко П.С., Васин А.В., Шейндлин М.А.</u> Измерение температуры плавления окиси кальция . . . . .	18
<u>Дьячков С.А., Левашов П.Р.</u> Исследование области применимости тепловой части термодинамических функций электронов в модели томаса-ферми . . . . .	18
<u>Фалыхов Т.М., Васин А.В., Шейндлин М.А.</u> Исследование температуры плавления карбида циркония . . . . .	19
<u>Быстрый Р.Г., Морозов И.В.</u> Молекулярно-динамическое моделирование кластерной неидеальной плазмы на графических процессорах . . . . .	19
<u>Куриленков Ю.К., Гуськов С.Ю., Тараканов В.П., Шевелева Е.Е.</u> О ядерном dd синтезе в схеме с электростатическим удержанием на основе наносекундного вакуумного разряда с рd анодом . . . . .	20

## **СЕКЦИЯ 7. БИОФИЗИКА И БИОХИМИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ПРОЦЕССОВ**

<u>Фомин В.М.</u> Газодинамические проблемы дыхания . . . . .	21
<u>Норман Г.Э., Ивановский Г.</u> Особенности диффузии в ионных жидкостях . . . . .	21

## **СЕКЦИЯ 8. УЛЬТРАКОРОТКИЕ ПРОЦЕССЫ НА ПОВЕРХНОСТИ**

<u>Бочкарев А.А., Полякова В.И.</u> Сублимация кристалла, заторможенная сорбцией инородных молекул из газовой среды . . . . .	22
---	----

## **СЕКЦИЯ 9. НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ НАНОТЕХНОЛОГИЙ**

<u>Губин С.А., Маклашова И.В., Мельникова К.С.</u> Оценка свойств двухкомпонентных композитов на основе оксида алюминия и оксида циркония . . . . .	23
<u>Верещагин А.С., Фомина А.Ф., Фомин В.М.</u> Математическое моделирование процесса сорбции гелия микросферами с учетом их неравномерного распределения по размерам и проницаемости . . . . .	23
<u>Андрющенко В.А., Рудяк В.Я.</u> Изучение молекулярной диффузии в пористых средах . . . . .	24
<u>Жаров А.А., Смирнова Д.А., Смирнов А.И.</u> Нелинейное резонансное управление пересекающимися световыми потоками (концепция туннельно-резонансного фотонного нанотриода) . . . . .	24
<u>Рудяк В.Я.</u> Физика микро- и нанотечений: состояние, проблемы и перспективы . . . . .	25
<u>Рудяк В.Я.</u> Механика, процессы переноса, флуктуации и необратимость . . . . .	25
<u>Вервигишко Д.Е., Школьников Е.И., Янцкин И.В., Саметов А.А., Атаманюк И.Н., Григоренко А.В.</u> Изучение физико-химических свойств различных активированных углей для применения их в электродах суперконденсаторов . . . . .	26
<u>Иванов Д.А., Рудяк В.Я.</u> Методики моделирования методом молекулярной динамики течений в каналах . . . . .	26
<u>Игошкин А.М., Головнев И.Ф., Фомин В.М.</u> Исследование границы раздела $ag/cu(111)$ методом классической молекулярной динамики . . . . .	27
<u>Казанин И.В., Зиновьев В.Н., Верещагин А.С., Лебига В.А., Пак А.Ю., Фомин В.М., Фомина А.Ф.</u> Экспериментальное исследование проницаемости наноструктурированных сорбентов по отношению к гелию и парам воды . . . . .	27
<u>Зиновьев В.Н., Казанин И.В., Лебига В.А., Пак А.Ю.</u> Экспериментальное исследование течения газа через тонкие проницаемые мембраны с наноканалами . . . . .	28
<u>Лысенко И.Ю., Башарин А.Ю.</u> Образование безводородной наноалмазной пленки при закалке жидкого углерода . . . . .	28
<u>Триандафилиди В.М.</u> Исследование эффекта самосборки для систем полимер-нанотрубка для полимерных солнечных батарей . . . . .	29
<b>ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ</b> . . . . .	30
<b>ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ</b> . . . . .	31

**AB INITIO МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА: ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ  
МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ И ГИБРИДНЫХ СУПЕР-ЭВМ**

*Жиляев П.А., Стегайлов В.В.\**

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*stegailov@gmail.com*

Продолжающееся непрерывное развитие теоретических и вычислительных методов атомистического моделирования на протяжении последних десятилетий обеспечивает основу средств анализа и прогноза для физики конденсированного состояния, материаловедения, химии, молекулярной биологии и нанотехнологий. Свойства материалов определяются откликом многоатомной систем на изменение внешних условий. Вообще говоря, для теоретического описания данного отклика не может быть достаточно методов кинетики и теории сплошных сред, а нужен выход на атомистический уровень описания. В настоящее время модели классической и квантовой молекулярной динамики (МД) находят все более и более широкую область применения [1]. В случае квантовой молекулярной динамики на настоящее время доступны системы до тысяч атомов и времена до десятков пикосекунд [2,3].

В работе представлен обзор методов распараллеливания алгоритмов ab initio молекулярной динамики на основе теории функционала электронной плотности [2-6] в базе плоских волн. Проанализированы требования к балансу вычислительной мощности узлов и коммутационной сети супер-ЭВМ с точки зрения достижения максимальной эффективности для примеров особенно требовательных в вычислительном отношении задач физики разогретого плотного вещества. Проанализированы методы параллелизации в вейвлетном базисе [7] и выигрыш в производительности при использовании гибридных вычислительных систем в этом случае.

Представлены результаты тестов на суперкомпьютерах МФТИ60, МВС-100К МСЦ РАН, К-100 ИПМ РАН и "Ломоносов"НИВЦ МГУ. Работа поддержана грантом РФФИ 11-01-12131-офи-м.

Литература:

1. Янилкин А.В., Жиляев П.А., Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Писарев В.В., Стегайлов В.В. Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11. С. 111-116.
2. Hutter J., Curioni A. Car-Parrinello molecular dynamics on massively parallel computers // ChemPhysChem. 2005. V. 6. P. 1788-1793.
3. Gygi F. et al. Practical algorithms to facilitate large-scale first-principles molecular dynamics // J. Phys.: Conf. Ser. 2009. V. 180. P. 012074.
4. Goedecker S. et al. An efficient 3-dim FFT for plane wave electronic structure calculations on massively parallel machines composed of multiprocessor nodes // Computer Physics Communications. 2003. V. 154. P. 105-110.
5. Bottin F. et al. Large-scale ab initio calculations based on three levels of parallelization // Computational Material Science. 2008. V. 42. P. 329-336.
6. Gonze X. et al. ABINIT: First-principles approach to material and nanosystem properties // Computer Physics Communications. 2009. V. 180. P. 2582-2615.
7. Genovese L. et al. Density functional theory calculation on many-cores hybrid central processing unit-graphic processing unit architectures // J. Chem. Physics. 2009. V. 131. P. 034103.

**ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИНТЕРФЕРОМЕТРА И  
ПРИМЕНИМОСТИ АКУСТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ  
УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ОТКОЛЬНЫХ ЯВЛЕНИЙ**

*Красюк И.К.<sup>1</sup>, Пашинин П.П.<sup>1</sup>, Семенов А.Ю.<sup>1</sup>, Стучебрюхов И.А.<sup>1</sup>, Хищенко К.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИОФ РАН, <sup>2</sup>ИТЭС ОИВТ РАН, Москва,

*\*krasyuk99@rambler.ru*

Метод лазерной интерферометрии широко используется при изучении откольных явлений [1-6]. Однако, при этом при интерпретации полученных интерферограмм не всегда учитывают аппаратную функцию интерферометра, что может приводить к неверным результатам. В связи с этим, в данном сообщении дан анализ особенностей применения лазерного интерферометра для получения графиков скорости свободной поверхности мишени при изучении ударно-волновых процессов субнаносекундной длительности [7].

Результаты измерений с помощью лазерного интерферометра лежат в основе определения величин откольной прочности исследуемого материала [8]. При этом для анализа ударно-волнового взаимодействия существенно используется акустическое приближение. Это приближение впервые было использовано при интерпретации откольных явлений при использовании взрывных метательных систем [9], позволяющих проводить исследования при миллисекундных и микросекундных длительностях ударно-волновых воздействий. Применение акустического приближения в этом случае оправдано, так как амплитуды ударного воздействия относительно невелики.

В последнее время при исследовании механических свойств вещества используется ударно-волновое воздействие наносекундной и субнаносекундной длительности большой амплитуды. В связи с этим в каждом эксперименте необходим анализ возможности применения акустического приближения для изучения характеристик откольного явления на основе графиков скорости движения свободной поверхности мишени. В докладе содержатся результаты анализа этих проблем методом численного моделирования и указаны возможные способы их решения. Показано, что результат определения откольной прочности по формулам акустического приближения существенно зависит как от формы импульса давления, так и от его амплитуды.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12-02-00625, 12-02-00746 и 11-02-12003-офи-м-2011), Программ Президиума РАН (№ 13П "Экстремальные световые поля и их приложения" и № 2П "Вещество при высоких плотностях энергии") и при государственной поддержке ведущих научных школ РФ (грант НШ-368.2012.2).

1. Barker L.M. and Hollenbach R.E. Shock-Wave Studies of PMMA, Fused Silica, and Sapphire. J. Appl. Phys. 1970. V. 41. N 10. P 4208.
2. Barker L.M. and Hollenbach R.E. Laser interferometer for measuring high velocities of reflecting surface. J. Appl. Phys. 1972. V. 43. N 11. P 4669.
3. Asay J.R. and Barker L.M. Interferometric measurement of shock-induced internal particle velocity and spatial variations of particle velocity. J. Appl. Phys. 1974. V. 45. N 6. P 2540.
4. Barker L.M. and Schuler K.W. Correction to the velocity-per-fringe relationship for the VISAR. J. Appl. Phys. 1974. V. 45. N 8. P 3692.
5. Беловолов М.И., Вовченко В.И., Канель Г.И., Красюк И.К., Кузнецов А.В., Прохоров А.М., Пашинин П.П., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Применение лазерных интерферометрических измерителей скорости во взрывных экспериментах. ЖТФ. Т. 57. В. 5. С. 918.
6. Bloomquist D.D. and Sheffield S.A. J. Appl. Phys. 1983. V. 54. N 4. P 1717. Optically recording interferometer for velocity measurements with subnanosecond resolution.
7. I.K. Krasnyuk, P.P. Pashinin, and A.Yu. Semenov. Specific Features of the Application of a Laser Interferometer in the Study of Shock-wave Phenomena. Laser Physics. 2006. Vol. 16. No. 9, pp. 1345-1351.
8. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996. 407 с.
9. Новиков С.А., Дивнов И.И., Иванов А.Г. Исследование разрушения стали, алюминия и меди при взрывном нагружении. Физика металлов и металловедение. 1966. Т. 21, вып. 4, 608- 615.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВА В ОБЛАСТИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ДАВЛЕНИЙ, СОЗДАВАЕМЫХ ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА ПИКОСЕКУНДНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

*Стучебрюхов И.А.\*<sup>1</sup>, Абросимов С.А.<sup>1</sup>, Бажулин А.П.<sup>1</sup>, Красюк И.К.<sup>1</sup>, Пашинин П.П.<sup>1</sup>, Семенов А.Ю.<sup>1</sup>, Хищенко К.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> ИОФ РАН, <sup>2</sup> ИТЭС ОИВТ РАН, Москва,

\*st777@kapella.gpi.ru

Использование лазеров с короткой длительностью излучения даёт уникальную возможность изучения прочностных свойств твердого тела при больших скоростях деформирования, недостижимых при других способах воздействия на исследуемые материалы. Динамическая прочность вещества в области предельно малых длительностей ударно-волновой нагрузки исследуется путём анализа откольных явлений при отражении импульсов сжатия от свободной поверхности мишени. После отражения импульса сжатия от тыльной поверхности внутри мишени генерируются растягивающие напряжения, которые могут привести к его внутреннему разрыву – отколу. В сообщении представлены результаты экспериментальных исследований динамической механической прочности алюминия, алюминий-магниевого сплава АМг6М, тантала, меди и полиметилметакрилата при воздействии на них импульсным лазерным излучением длительностью 70 пс. В предшествующих опытах авторов длительность лазерного импульса составляла 2.5 нс [1 - 3]. Было установлено, что предельная прочность исследуемых материалов может быть достигнута при значительном увеличении амплитуды ударного воздействия, что, по-видимому, приводит к упрочнению материала. Альтернативный способ достижения больших скоростей деформирования – это сокращение длительности ударного воздействия. Воздействие на мишень лазерным импульсом длительностью 70 пс позволило реализовать в настоящем исследовании скорости деформирования выше  $10^7 \text{ с}^{-1}$ . Эксперименты показали, что полученные экспериментальные данные при пороговых условиях появления откола укладываются на продолжение функциональных зависимостей исследуемых материалов, полученных при больших длительностях ударно-волнового воздействия [4]. Можно предположить, что в условиях проведенных экспериментов не происходит значительного упрочнения исследованных материалов. Дальнейшее увеличение ударного воздействия на мишень в этом случае приводит к более резкому возрастанию величины откольной прочности от скорости деформирования, что указывает на изменение механической прочности материала в сторону ее увеличения. Было выяснено, что поведение вещества в области отрицательных давлений при использовании методов лазерного воздействия зависит в большой степени от предыстории динамического нагружения, включающей в себя много факторов, среди которых существенное значение имеют как амплитуда, так и длительность импульса ударного сжатия мишени.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12-02-00625, 12-02-00746 и 11-02-12003-офи-м-2011), Программ Президиума РАН (№ 13П "Экстремальные световые поля и их приложения" и № 2П "Вещество при высоких плотностях энергии") и при государственной поддержке ведущих научных школ РФ (грант НШ-368.2012.2).

1. Вовченко В.И., Красюк И.К., Пашинин П.П., Семенов А.Ю. // Прикладная физика. 2009. №1. С. 12–17.
2. Батани Д., Вовченко В.И., Канель Г.И. и др. // ДАН. 2003. Т. 389. № 3. С. 328–331.
3. Geras'kin A.A., Khishchenko K.V., Krasnyuk I.K. et al. // Contrib. Plasma Phys. 2009. V. 49. №7–8. P. 451–454.
4. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996. 407 с.

## АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ГРАФИТА

*Орехов Н.Д.\* , Стегайлов В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*nikita.orekhov@gmail.com*

Графит относится к наиболее тугоплавким материалам, что предопределило его широкое распространение в промышленности. Физические свойства графита при высоких температурах активно изучаются в течение, по крайней мере, полувека, но, несмотря на большое число экспериментальных и теоретических исследований, знания о фазовой диаграмме углерода для давлений до 100 ГПа носят фрагментированный характер, поскольку эксперименты при таких условиях трудноосуществимы.

В данной работе методом молекулярной динамики исследуется процесс плавления графита при больших давлениях. Измерение температуры плавления осуществляется методом двухфазного моделирования. Для описания взаимодействия атомов углерода используется эмпирический потенциал AIREBO [1]. Получена кривая плавления графита для интервала давлений от 2 до 14 ГПа, лежащая в диапазоне температур 4350 - 4500 К. Отмечена слабая зависимость наклона кривой плавления от давления, а также наличие максимума в диапазоне давлений 6 - 8 ГПа, что согласуется со многими экспериментальными работами [2,3].

В работе также рассчитана зависимость плотности и координационного состава жидкого углерода от давления. Результаты показывают, что доли трех- и четырехкоординационных атомов в диапазоне 2 - 14 ГПа меняются достаточно слабо, что свидетельствует об отсутствии ярко выраженного фазового перехода между алмазоподобным и графитоподобным жидким углеродом.

1. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. // J. Chem. Phys. 2000. V.112. №14. P.6472.
2. Bundy F.P. // J. Chem. Phys. 1963. V.38. P.618.
3. Togaya M. // Phys. Rev. Lett. 1994 V.79. 2474

## ВЫДЕЛЕНИЕ МАСШТАБНЫХ УРОВНЕЙ ПРИ РАЗРУШЕНИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

*Груздков А.А.<sup>\*1</sup>, Петров Ю.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>СПбГУ, <sup>2</sup>ИПМАШ РАН, Санкт-Петербург,

\*gruzdkov@mail.ru

Представление о том, что разрушение представляет собой процесс, протекающий на различных масштабных уровнях в настоящее время становится общепринятым. Общеизвестным является также тот факт, что на различных масштабных уровнях прочностные характеристики материалов могут радикально различаться, что порождает серьезную проблему — параметры, определенные по результатам испытаний на одном уровне (лабораторном), могут оказаться неадекватными для расчетов на другом уровне, например, при расчете на прочность крупногабаритных конструкций или, наоборот, микрообъектов.

Несмотря на большое количество работ, посвященных данной проблематике нет единства в понимании ключевых вопросов:

- как выделить отдельный масштабный уровень;
- какие испытания являются корректными для определения прочностных характеристик на данном уровне;
- как по результатам испытаний на одном уровне предсказывать (если это вообще возможно) значения прочностных характеристик на другом уровне.

В работах Г. Нейбера, а позднее В. В. Новожилова, был введен характерный линейный размер разрушения, который определялся сопоставлением прочности «бездефектных» образцов и образцов с макроскопическими дефектами типа трещин:

$$d = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{K_{Ic}^2}{\sigma_c^2},$$

где  $K_{Ic}$  — критический коэффициент интенсивности напряжений,  $\sigma_c$  — предел прочности. В дальнейшем была показана необходимость введения характерного масштаба также и по временной шкале — «инкубационного времени» ( $\tau$ ), что позволяет ввести второй линейный размер, характеризующий данный масштабный уровень разрушения:  $D = c\tau$ , где  $c$  — скорость упругой волны. Предположение, что верхняя граница масштабного уровня является нижней границей следующего уровня позволяет выстроить иерархию масштабных уровней и ответить на ряд принципиальных вопросов.

Основные выводы:

- корректное выделение масштабного уровня требует учета динамических особенностей процессов;
- масштабный уровень должен характеризоваться двумя характерными размерами — верхним и нижним ;
- при проведении испытаний важно отслеживать некорректные переходы с одного уровня на другой, что может приводить к неадекватным оценкам прочностных характеристик.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕТРАГОНАЛЬНОГО ИСКАЖЕНИЯ МАРТЕНСИТА ЖЕЛЕЗО-УГЛЕРОДНЫХ СПЛАВОВ

Чирков П.В.\*, Мирзоев А.А.

ЮУрГУ, Челябинск,

\*p.chirkow@yandex.ru

В настоящее время железо и его сплавы с углеродом (стали) являются важнейшими материалами современной техники. При быстром охлаждении (закалки) сталей происходит образование мартенситной (тетрагональной структуры), сопровождающееся существенным ростом твердости и прочности. Для того чтобы управлять прочностными характеристиками материалов на основе железа, необходимо понять природу этого превращения, однако результаты разработанных статистических теорий мартенситного перехода [1] значительно отличаются от данных экспериментальных исследований [2].

Данная работа посвящена моделированию методом молекулярной динамики твердого раствора железа с углеродом с применением потенциала погруженного атома Lau [3], следуя подходу, использованному в работе [4]. В ходе работы была оценена энергия упругих деформаций кристаллической решетки при растворении атома углерода в октаэдрической поре ОЦК решетки железа. Для адекватного воспроизведения упругого взаимодействия соседних атомов углерода была проведена модификация исходного потенциала Lau.

С применением модифицированного потенциала была рассчитана зависимость степени тетрагональности от концентрации углерода. Результаты находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными и результатами компьютерного моделирования.

1. Хачатурян А.Г., Шталов Г.А. К теории упорядочения атомов углерода в кристалле мартенсита // Физика металлов и металловедение, т.32. вып.1. с. 5-13. 1971
2. Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. Превращения в железе и стали // М.: Наука. 1977
3. T. Lau, Clemens J. F. Eorst. Many-Body Potential for Point Defect Clusters in Fe-C Alloys // Phys. Rev. Let. Vol. 98. no. 21. 215501. 2007
4. A. Udyansky, J. von Pezold. Interplay between long-range elastic and short-range chemical interactions in Fe-C martensite formation // Phys. Rev. B Vol. 79. no. 12. 224112. 2009

КИНЕТИКА ОБРАЗОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЗАРОДЫШЕЙ В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ ПО ДАННЫМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Писарев В.В.

ОИВТ РАН, Москва,

pisarevv@gmail.com

Методом молекулярной динамики (МД) исследована кинетика кристаллизации переохлажденного расплава алюминия. Расплав описывается потенциалом погруженного атома (EAM). Процесс зародышеобразования моделируется в ячейке постоянного объема.

Из МД расчетов получены времена жизни гомогенной фазы при различных условиях. Определена частота гомогенной нуклеации из соотношения  $J = 1/N\langle t \rangle$ , где  $N$  – число атомов в расчетной ячейке,  $\langle t \rangle$  – среднее время жизни гомогенной фазы при заданных  $(T, \rho)$ . Определена зависимость частоты нуклеации от давления и температуры. Эта зависимость аппроксимируется формулами классической теории нуклеации [1].

Также исследована кинетика образования околокритического зародыша методом "среднего времени первого прохождения" (mean first-passage time – MFPT) [2]. В МД расчетах MFPT определялось как среднее время  $\tau(n)$ , за которое кластер новой фазы впервые достигает размера, равного или большего  $n$ . Для случая энергетического профиля реакции с единственным максимумом в [2] выведена формула

$$\tau(n) = \frac{\langle t \rangle}{2} [1 + \operatorname{erf}(b(n - n^*))],$$

где  $n^*$  – размер критического зародыша. Данная формула хорошо описывает кинетику образования зародыша при больших переохлаждениях, однако при понижении переохлаждения наблюдаются "ступеньки" в зависимости  $\tau(n)$ . Наличие этих ступенек связывается с пониженной стабильностью кристаллических кластеров определенных размеров.

1. Kelton K. F. // Solid State Physics – Advances in Research and Applications. 1991. V. 45. Pp. 75-177.
2. Wedekind J., Strey R., Reguera D. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. No. 13. P. 134103.

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ

Смирнов Г.С.

ОИВТ РАН, Москва,

grs90@mail.ru

Газовые гидраты – это кристаллические соединения, состоящие из молекул воды (образующих кристаллическую решётку) и газа, заключенных в полости решётки без образования химической связи. Решётка стабилизируется за счёт взаимодействия Ван-дер-Ваальса между водой и молекулами газа. Газовые гидраты считаются перспективным источником топлива, рассматриваются как средство хранения и транспортировки газа. Исследовано время жизни метастабильных состояний, рассчитана кинетическая граница устойчивости и кривая плавления, изучено



процессы нуклеации при формировании и распаде газовых гидратов, полученные результаты сравнены с экспериментом.

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕКЛОВАНИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА АЛЮМИНИЯ

*Колотова Л.Н.\* , Норман Г.Э., Писарев В.В.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва,*

*\*lada.kolotova@gmail.com*

В данной работе с помощью метода молекулярной динамики (МД) рассматривается процесс перехода в аморфное состояние. Для МД моделирования алюминия используется потенциал погруженного атома (EAM — embedded atom method). Рассматриваются режимы охлаждения при постоянном объеме и постоянном давлении. Изучается влияние скорости охлаждения на «уравнения состояния» аморфного металла. Интервал стеклования определяется по расщеплению второго пика парной корреляционной функции.

При охлаждении расплава в температурном интервале стеклования обнаружено увеличение числа атомов, имеющих кристаллическое окружение, и энергии активации самодиффузии.

Показано, что при скоростях охлаждения выше  $10^{12}$  К/с температура стеклования повышается с увеличением скорости охлаждения, что согласуется с теоретическими моделями стеклования. При скоростях охлаждения ниже  $10^{12}$  К/с температура стеклования остается практически постоянной.

Наблюдается релаксация давления в состояниях, полученных при высоких скоростях охлаждения. Для времени релаксации получена оценка 100 пс при 300 К.

В отличие от фазовых переходов переход в аморфное состояние происходит только при скоростях охлаждения больше критической скорости. Найдены критические скорости охлаждения для изохорного ( $2,64 \text{ г/см}^3$ ) и изобарного ( $P=0$ ) режимов. Они составляют  $12^{10}$  К/с и  $6^{10}$  К/с соответственно.

**ПРОЦЕССЫ ИОНИЗАЦИИ И РАЗДЕЛЕНИЕ ЗАРЯДОВ ВО ФРОНТЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В  
СМЕСИ ГЕЛИЯ С МАЛОЙ ПРИМЕСЬЮ ТЯЖЕЛЫХ МОЛЕКУЛ**

*Шумова В.В.\* , Зиборов В.С., Ефремов В.П.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*shumova@ihed.ras.ru*

Цель работы состояла в разработке и применении методов экспериментального исследования элементарных процессов вблизи фронта слабой ударной волны, распространяющейся в смеси легкого и тяжелого газов. Исследованы электрофизические и излучательные свойства фронта ударной волны, распространяющейся в гелии, содержащем малую добавку тяжелых молекул гексакарбонила молибдена  $\text{Mo}(\text{CO})_6$ . Малая концентрация тяжелых молекул и соотношение масс компонентов смеси 264/4 обеспечили большую длину зоны их поступательной релаксации.

Генератором падающих ударных волн служила высоковакуумная ударная труба «НЕФРИТ». Остаточное давление газа составляло  $\sim 5 \cdot 10^{-6}$  мм рт. ст., концентрация примесей была на два порядка меньше концентрации  $\text{Mo}(\text{CO})_6$ . Влиянием столкновений тяжелых молекул друг с другом на исследуемые процессы можно было пренебречь на интересующих промежутках времени. Измерения проведены в падающих ударной волны с числом Маха  $M = (2.4 \div 3.5)$ , равновесные параметры за фронтом УВ составляли  $P_2 = (0.109 \div 1.124)$  атм.,  $T_2 = (850 \div 1280)$  К.

Использованы методы многоканальной спектрометрии и электростатический зонд высокого пространственного и временного разрешения. Впервые обнаружена зона проводимости вблизи градиента плотности ударной волны при умеренных значениях давления и температуры за ударной волной. Обнаружен эффект разделения зарядов во фронте ударной волны. Получена эффективная энергия ионизации процесса ( $\sim 0.7$  эВ). Установлено, что длина прекурсора в спектроскопических и зондовых измерениях пропорциональна квадрату средней массовой скорости ударной волны и обратно пропорциональна концентрации заряженных частиц. Концентрация заряженных частиц вблизи градиента плотности ударной волны составила  $5 \cdot 10^4 \div 5 \cdot 10^6$  см $^{-3}$ .

**ИЗМЕРЕНИЕ И РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ ЭПОКСИДНОЙ СМОЛЫ  
ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ**

*Хищенко К.В.<sup>1</sup>, Бордзиловский С.А.<sup>2</sup>, Караханов С.М.<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, <sup>2</sup>ИГиЛ СО РАН, Новосибирск,*

*\*konst@ihed.ras.ru*

В настоящей работе экспериментально исследовалась спектральная светимость, регистрируемая в направлении распространения ударного фронта при сжатии образцов эпоксидной смолы ЕС141 NF ударными волнами интенсивностью 29–42 ГПа. Проводился анализ профилей измеряемой спектральной светимости при разных давлениях. Определена яркостная температура ударно-сжатых образцов смолы в исследованном диапазоне нагружения. Полученные экспериментальные данные в пределах точности измерения согласуются с результатами расчетов по уравнению состояния с учетом физико-химического превращения эпоксидной смолы при высоких давлениях и температурах за ударным фронтом.

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА С РАСЩЕПЛЕННЫМИ ВОЛНОВЫМИ ПАКЕТАМИ:  
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПЕРЕМЕННОГО ШАГА ПО ВРЕМЕНИ**

*Валуев И.А., Казеев Н.А.\* , Морозов И.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*kazeevn@gmail.com*

Метод классической молекулярной динамики (МД) широко используется для моделирования неидеальной плазмы [1, 2]. Однако, применимость МД ограничена невырожденной и полностью ионизированной плазмой в состоянии, близком к равновесию, что плохо подходит для описания реальных экспериментальных условий. Один из возможных способов улучшения метода без существенной потери производительности — рассмотрение электронов как волновых пакетов [3]. При этом отпадает необходимость в построении квазиклассического потенциала электрон-ионного взаимодействия, увеличивается точность моделирования столкновений частиц, процессов ионизации и рекомбинации. Этот метод получил название Молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП). Более того, антисимметризация волновых пакетов позволяет учесть обменное взаимодействие между электронами в рамках приближения Хартри-Фока [4].

Отдельного внимания заслуживает метод МДВП с расщепленными волновыми пакетами, в котором волновая функция каждого электрона представляется в базе нескольких гауссианов [5]. Как показали расчеты, этот подход позволяет воспроизвести энергию основного состояния водорода и гелия с точностью не хуже 1% всего для трех гауссовских пакетов на электрон. Существенным преимуществом является также возможность моделировать квантовые эффекты, связанные с расщеплением волновой функции, например, при прохождении через потенциальный барьер.

Несмотря на схожесть с классической МД, характер уравнений движения частиц в методе МДВП таков, что небольшое изменение параметров волновых пакетов может приводить к появлению больших “сил”, т.е. производных этих параметров. В данной работе описываются различные подходы к интегрированию уравнений движения с переменным шагом по времени. Алгоритм основан на обеспечении заданной точности сохранения полной энергии на каждом шаге интегрирования (пример для классической МД см. в [6]).

Ожидается, что разработанный метод позволит существенно расширить область применимости МД, в том числе на состояния плотного разогретого вещества (Warm Dense Matter).

1. Morozov I. V., Norman G. E. // J. Exp. Theor. Phys. 2005. V. 100. No. 2. P. 370-384.
2. Raitza T., Reinholz H., Röpke G., Morozov I., Surraud E. // Contrib. Plasma Phys. 2009. V. 49. P. 496.
3. D. Klakow, C. Toepffer, P. G. Reinhard, J. Chem. Phys. 1994. V. 101. P. 10766.
4. B. Jakob, P. G. Reinhard, C. Toepffer, G. Zwicknagel, J. Phys. A. 2009. V. 42. P. 214055.
5. Morozov I. V., Valuev I. A. // Contrib. Plasma Phys. 2012. V. 52. P. 140–144.
6. Steven J. Stuart, Jacob M. Hicks, and Michael T. Mury. An Iterative Variable-Timestep Algorithm for Molecular Dynamics Simulations // Molecular Simulation. 2003, Vol. 29, Issue 3

**ПРИМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ ДЛЯ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ.**

*Тимофеев А.В.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва,*

*timofeevalv1@gmail.com*

Исследование теплофизических свойств систем пылевых частиц в плазме необходимо для дальнейшего развития теории пылевой плазмы. Обнаруженное в эксперименте различие средней кинетической энергии вертикального и горизонтального движения пылевых частиц в плазме газового разряда стимулирует исследование влияния анизотропии системы на её теплофизические свойства. Необходимо выяснить границы применимости термодинамических величин для описания пылевой плазмы в условиях отличающихся средних кинетических энергий горизонтального и вертикального движения.

Для анализа влияния анизотропии системы на её свойства проводится молекулярно-динамическое моделирование пылевой плазмы на основе созданной модели пылевых частиц в плазме газового разряда с учётом флуктуаций заряда частиц, зависимостью заряда от расстояния до электрода и до других пылевых частиц, с учётом особенностей приэлектродного слоя разряда и анизотропии системы. В модели учтены эффект конечного времени зарядки, сила ионного увлечения, эффект «ion wake». Для исследования зависимости свойств системы от её параметров используется методика с варьированием параметров. Большое число параметров и высокая вычислительная сложность такой задачи приводит к необходимости проводить большое число расчётов, что возможно осуществить в разумное время только на больших вычислительных кластерах. Вычислительная сложность обусловлена резким отличием временных масштабов характерных процессов в системе, что требует значительно больше миллиарда шагов для вывода системы на равновесие, а также необходимостью проводить варьирование примерно 17 параметров, что равнозначно необходимости заполнить сетку в 17-мерном пространстве, где каждый узел сетки соответствует какому-то набору параметров и как минимум одному численному эксперименту.

На основе моделирования проводится исследование теплофизических свойств (теплоёмкость, теплопроводность, ..) системы и границ применимости термодинамических параметров.

**ДИНАМИКА ПЕРЕТЯЖКИ В X-ПИНЧАХ**

*Орешкин В.И.\*<sup>1</sup>, Чайковский С.А.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИЭС СО РАН, Томск, <sup>2</sup>ФИАН, Москва,

*\*oreshkin@ovpe.hcei.tsc.ru*

В работе рассматривается модель процесса формирования перетяжки X-пинча, которая включает в себя три этапа: электрический взрыв металлических проводников, из которых состоит X-пинч; разлет, который происходит за счет превышения газокинетического давления над давлением магнитного поля; сжатие, сопровождающееся вытеканием вещества из области перетяжки. Модель позволяет определить минимальную величину скорости нарастания тока, при которой возможно формирование «горячей точки» X-пинча. Минимальная скорость нарастания тока определяется термодинамическими параметрами проводника в критической точке и по порядку величины близка к 1 кА/нс. На основе анализа динамики сжатия перетяжки обоснован скейлинг, позволяющий объяснить экспериментальные зависимости времени появления импульса рентгеновского излучения от тока и массы X-пинчей.

Работа выполнена при поддержке РФФИ гранты № 12-08-00868-а, № 10-02-00938-а.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКОГО ГАЗОВОГО РАЗРЯДА В СВЕРХЗВУКОВОМ ВОЗДУШНОМ ПОТОКЕ : ВОЛНОВАЯ СТРУКТУРА СЛЕДА**

*Бобарыкина Т.А.\*, Малов А.Н., Оришнич А.М., Чиркашенко В.Ф., Яковлев В.И.*

*ИТПМ СО РАН, Новосибирск,*

*\*bobarykina.tatyana@gmail.com*

Для решения многих практических задач используются методы активного воздействия на формирование течения вблизи обтекаемого тела (подвод массы, энергии и отвод энергии [1-2]). Требуется обеспечить эффективный ввод энергии в сверхзвуковой поток воздуха. Одним из способов дистанционного нагрева газа является применение энергии лазерного излучения. При этом зона энерговода определяется оптическим пробоем воздуха в нужной точке и созданием условий для эффективного поглощения энергии лазерного излучения в созданной плазме. В [3] определены пороговые параметры потока, при которых обеспечивается наиболее эффективное (до 70 процентов) поглощение энергии лазерного излучения плазмой оптического разряда.

В работе используется разработанный в ИТПМ аналитический метод [4], который позволяет по известным энергетическим характеристикам импульсно-периодического излучения прогнозировать параметры течения в тепловом следе. Важным в практическом отношении является подвод лазерного излучения перпендикулярно вектору скорости потока.

Целью данной работы является получение экспериментальных данных о волновой структуре за областью протяженной, ориентированной перпендикулярно вектору скорости сверхзвукового потока воздуха импульсно-периодической плазмы пробоя.

Сверхзвуковой поток воздуха создавался на компактном газодинамическом стенде, обеспечивающем число  $M=1.9$  при диаметре среза сопла 10мм. При этом расход газа составлял 2-2,5 кг/с. Визуализация волновой структуры осуществлялась теневым методом. Для регистрации изображения использовалась высокоскоростная камера pco.1200 hs (10bit CMOS camera system). Оптический разряд в сверхзвуковом потоке воздуха формировался при фокусировке ( $f=63$ мм) импульсно-периодического излучения  $CO_2$  лазера с механической модуляцией добротности. Средняя мощность генерации – до 3,5 кВт, частота следования импульсов – 53,9 кГц, импульсная мощность – до

200 кВт. Ввод лазерного излучения осуществлялся перпендикулярно вектору скорости сверхзвукового потока. Измерялась временная форма падающего и прошедшего лазерного излучения фотодиодом ФСГ 22-3А1. Проведены измерения статического и полного давления с помощью тензотерических датчиков типа ТДМ-А.

Анализ полученных данных позволил определить общие закономерности взаимодействия лазерной плазмы с потоком в ранее не изученных условиях, провести корректировку используемых подходов и методов расчетного анализа. Установлены новые возможности использования импульсно-периодического лазерного излучения в экспериментах, направленных на решение задач управления течениями.

1. Гаранин А.Ф., Третьяков П.К., Чиркашенко В.Ф., Юдинцев Ю.Н. Управление параметрами ударных волн путем подвода массы и энергии // Известия РАН. Сер. Механика жидкости и газа. 2001. № 5. С. 186–193.
2. Фомин В.М., Чиркашенко В.Ф., Волков В.Ф., Харитонов А.М. Управление уровнем звукового удара, создаваемого летательным аппаратом, путем криогенного воздействия на процесс обтекания. 1. Охлаждение поверхности летательного аппарата // Прикладная механика и техническая физика. 2008. Т. 49. № 6. С. 88–98.
3. Малов А.Н., Оришич А.М., Бобарыкина Т. А., Чиркашенко В.Ф. Поглощение излучения СО<sub>2</sub>- лазера в плазме оптического разряда в сверхзвуковом воздушном потоке // XV Международная конференция по методам аэрофизических исследований. Новосибирск, 2010г. часть 2. - С.157.
4. Третьяков П.К., Тушкин А.В., Яковлев В.И. Пространственно-временные масштабы газодинамической структуры сверхзвукового течения с импульсно-периодическим лазерным энерговодом // Препринт № 9. ИТПМ СО РАН. 1997.

## ПОЛОЖИТЕЛЬНЫЙ СТОЛБ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА В НЕОНЕ С МИКРОЧАСТИЦАМИ

*Поляков Д.Н.\* , Василяк Л.М., Шумова В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*cryolab@ihed.ras.ru*

Плазма с частицами конденсированной дисперсной фазы служит рабочей средой технологических устройств различного типа, используемых для плазменной обработки поверхностей и плазменного напыления, в том числе на поверхности микрочастиц. В качестве плазмообразующего газа в этих устройствах широко применяется неон. Представленное в данной работе экспериментальное и численное исследование положительного столба тлеющего разряда в неоне выполнено с целью изучения и построения модели изменения параметров плазмы неона, индуцированного частицами микронного размера, введенными в разряд.

Эксперименты проведены при давлении неона 0.35 Торр в цилиндрической разрядной трубке радиусом 8 мм, длиной 40 см. В стенки трубки были впаяны два кольцевых электрода для измерения падения напряжения на разрядном промежутке, где образовывались пылевые структуры из вводимых сверху в разряд микрочастиц. Использованы монодисперсные частицы меламинформальдегида размером 2.55  $\mu\text{m}$ . Регистрировались изображения микрочастиц, падение напряжение между измерительными кольцами, и соответствующее падение напряжения в свободном разряде. Пылевые структуры вызывали дополнительные объемные потери электронов и изменяли ионизационное равновесие плазмы, что требовало повышения напряженности электрического поля для поддержания тока разряда. Наибольшее повышение напряженности электрического поля регистрировалось в присутствии протяженных, а также пространственно устойчивых пылевых структур, которые наблюдались при токе 0.5 – 1 мА. Моделирование проведено на основе диффузионной модели однородного положительного столба тлеющего разряда с пылевыми частицами, использованной ранее для описания разряда в воздухе [1]. В рамках этой модели в неоне рассмотрено образование и диффузия электронов, ионов и метастабилей неона, которые играют существенную роль в ионизации. Электронная температура, транспортные коэффициенты и константы скоростей реакций возбуждения и ионизации с участием электронов рассчитаны с помощью пакета BOLSIG+ [2] на основе данных по сечениям реакций, приведенных в SIGLO Database [3]. Зарядка частиц рассмотрена на основе приближения ограниченного орбитального движения. Рассмотрено тушение метастабильных атомов как на стенках разрядной трубки, так и на микрочастицах в объеме пылевой структуры. Профиль распределения микрочастиц в разряде задавался ступенчатой размытой функцией.

Рассчитаны радиальные распределения компонентов плазмы в свободном разряде и в присутствии пылевых структур различной плотности и размера. Проведено сравнение расчетного и измеренного приращения напряженности продольного электрического поля в разряде с микрочастицами по сравнению со свободным разрядом. Получено удовлетворительное согласие данных.

1. Polyakov D. N., Vasilyak L. M., Shumova V. V., Fortov V. E. // Phys. Let. A. 2011. V.375. No37. P.3300-05.
2. Hagelaar G. J. M. , Pitchford L. C. // Plasma Sources Sci. Technol. 2005. V.14. No 722. doi:10.1088/0963-0252/14/4/011.
3. Morgan W.L., Boeuf J.P. , Pitchford L.C. // The SIGLO Database. 1995. CPAT and Kinema Software <http://www.siglo-kinema.com>.

## РЕКОМБИНАЦИЯ В ПЛОТНОЙ ИОННОЙ ПЛАЗМЕ

*Ланкин А.В.\* , Норман Г.Э.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*Alex198508@yandex.ru*

Работа посвящена изучению особенностей процесса рекомбинации в плотной ионной плазме, возникающей в среде фтора, элегаза и водяных паров. Процессы рекомбинации в ионной плазме имеют ряд особенностей, отличающих их от рекомбинации в электрон-ионной плазме. Концентрация ионов в ионной плазме практически всегда мала по сравнению с концентрацией нейтральной компоненты и столкновения ионов с нейтральными молекулами существенно преобладают над столкновениями между заряженными частицами. Данное обстоятельство в сочетании со сравнительно низкими значениями температуры такой системы создаёт условия для формирования сложных кластерных ионов. Влияние перечисленных факторов может менять характер зависимости скорости рекомбинации от степени неидеальности в случае ионной плазмы по сравнению с электрон-ионной. Наконец, если

в электрон-ионной плазме для осуществления акта рекомбинации пара частиц должна передать избыток энергии окружающей среде, то в случае ионной плазмы такая необходимость отсутствует. Достаточным условием рекомбинации двух противоположно заряженных ионов является их сближение на расстояние, когда возможен туннельный перенос электрона с отрицательного иона на положительный.

Различные сочетания перечисленных факторов могут давать различные механизмы рекомбинации в ионной плазме. При очень низких значениях плотности системы преобладают парные процессы, в которых сближение ионов происходит по баллистическим траекториям. По мере повышения плотности происходит увеличение роли многочастичных процессов, в результате чего рекомбинация начинает протекать преимущественно через промежуточное образование ионной пары, которая по мере своей эволюции постепенно отдаёт энергию окружающей среде, а ионы в ней сближаются вплоть до того момента, пока расстояние между ними не станет меньше критического. Такой механизм рекомбинации ионов оказывается близок к механизму столкновительной рекомбинации в электрон-ионной плазме. В разреженной идеальной плазме этот процесс хорошо изучен и определяется трёхчастичными столкновениями пары заряженных частиц с третьей, заряженной или нейтральной. Однако для сильнонеидеальной плазмы такое приближение уже не работает, и процесс рекомбинации определяется не тройными столкновениями, а взаимодействием частиц с коллективным микрополем плазмы. При этом зона многочастичных флуктуаций  $\Delta E$ , разделяющая по энергии области парных состояний и свободных электронов, становится больше температуры. Это приводит к снижению скорости рекомбинации [1]. Сольватация ионов может стать другим фактором, снижающим скорость рекомбинации.

В данной работе рассмотрены особенности рекомбинации ионной плазмы в режиме многочастичных столкновений на примере плазмы послесвечения разряда в среде фтора и элегаза. Дано теоретическое объяснение снижения константы скорости рекомбинации плазмы в таких средах по мере повышения степени их неидеальности, наблюдаемого в эксперименте [2]. Показано, что в случае плазмы возникающей в среде фтора процесс рекомбинации носит двухстадийный характер с промежуточным образованием неустойчивых рыхлых ионных пар ион-молекулярными кластерами, тогда как в среде элегаза процесс образования таких пар не оказывает существенного влияния на скорость рекомбинации. Кроме того, рассматриваются особенности рекомбинации ионов в диффузионном режиме на примере рекомбинации ионов кислорода в среде водяных паров.

1. A.Lankin, G. Norman Density and nonideality effects in plasmas, Contrib. Plasma Phys. 2009. V.49, No. 10. P. 723 – 731
2. Амиров Р.Х. Дис. док. ф.-м. наук. Москва, 2000. 214 с.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ ВОЛН В ГИПЕРЗВУКОВЫХ ПОГРАНИЧНЫХ СЛОЯХ

*Шиплюк А.Н.*

*ИТПМ СО РАН, Новосибирск,*

*shipluk@itam.nsc.ru*

Проблема ламинарно-турбулентного перехода является одной из критических задач, от решения которой зависит возможность создания экономически эффективных летательных аппаратов, движущихся длительное время с гиперзвуковыми скоростями. Возникновение турбулентности происходит из-за потери устойчивости исходного ламинарного течения при малой интенсивности возмущений во внешней среде. Ламинарно-турбулентный переход в слабоградиентных до- и сверхзвуковых пограничных слоях вызывается вихревыми возмущениями первой моды (волна Толлмина-Шлихтинга). При гиперзвуковых скоростях переход вызывается высокочастотной второй модой возмущений. В отличие от первой моды, вторая – результат невязкой неустойчивости и является акустической по природе.

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований развития высокочастотных волн в гиперзвуковых пограничных слоях. Механизмы развития возмущений в гиперзвуковых пограничных слоях изучались с помощью моделирования волновых процессов методом искусственных волновых пакетов.

Для введения искусственных волновых пакетов в гиперзвуковой поток использовался электроразрядный источник возмущений, обеспечивающий следующие характеристики:

- высокая частота вводимых возмущений (диапазон частот наиболее неустойчивых возмущений 200-300 кГц для условий данной работы);
- высокая стабильность по крайней мере в течение одного пуска (при продолжительности пуска 30 мин и частоте 300 кГц количество разрядов составляет  $5 \times 10^8$ );
- малая область возбуждения  $< 1,5$  мм (для условий данной работы длина волны возмущений второй моды 2-3 мм, для эффективной генерации возмущений второй моды размер области возбуждения должен быть меньше половины длины волны возмущения, т.е. 1-1,5 мм);
- достаточную мощность вводимых возмущений (для точечного источника максимальная мощность составляла 10 Вт, для двумерного источника – 100 Вт).

Для измерения генерируемых в пограничном слое волн использовался термоанемометрический метода.

Впервые выполнено экспериментальное моделирование развития возмущений первой и второй моды в гиперзвуковых пограничных слоях острого и затупленного конусов. Экспериментально установлено, что в гиперзвуковом пограничном слое наиболее неустойчивыми возмущениями первой моды являются трехмерные волны с углами наклона волновых векторов  $40 - 49^\circ$ . Показано, что появление сильно наклоненных волн ( $70^\circ$ ) вызвано субгармоническим нелинейным взаимодействием возмущений основной частоты и первой гармоники.

**ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛОВ  
С ГОРЯЧИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ**

*Жильяев П.А.\* , Стегайлов В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*PeterZhilyaev@gmail.com*

При воздействии ультракороткого лазерного излучения металл переходит в двухтемпературное (2Т) состояние, в котором температура электронной подсистемы ( $T_e$ ) на порядки превышает температуры ионов. 2Т стадия является важной для понимания механизмов лазерной абляции, так как на ней происходит передача лазерной энергии ионам и формируется слой прогрева, который определяет дальнейшую динамику системы. Для численного моделирования лазерной абляции необходимы кинетические коэффициенты металла с горячими электронами. Однако, в литературе применяются феноменологические зависимости, коэффициенты в которых определяются из асимптотик при низких и высоких  $T_e$ . Таких недостатков лишены первопринципные методы в которых нет подгоночных параметров. В работе представлен первопринципный расчет коэффициента теплопроводности металла с горячими электронами, вычисленный по формуле Кубо-Гринвуда. Расчет проводится для жидкого алюминия в интервале  $T_e$  от 0 до 6 эВ. Полученная зависимость коэффициента теплопроводности от  $T_e$  хорошо согласуется с расчетами из кинетического уравнения [1].

1. Иногамов Н. А., Петров В.Ю. // ЖЭТФ 2010. V.134. №3. P.505.

**РАСЧЕТ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ, СОЗДАВАЕМЫХ В КРИСТАЛЛАХ КАМЕННОЙ СОЛИ  
УЛЬТРАКОРОТКИМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ**

*Савинцев А.П.\* , Гавашели Ю.О.*

*КБГУ, Нальчик,*

*\*pnr@kbsu.ru*

Опираясь на фазовые диаграммы можно провести анализ переходов, возникающих при облучении диэлектрической среды интенсивными световыми потоками. В нашей работе рассмотрена фазовая диаграмма каменной соли, на поверхности и в приповерхностном объеме которой (например, при облучении ультракороткими лазерными импульсами) созданы достаточно высокие давления.

Физические характеристики и тепловые параметры твердотельной фазы рассматриваемого соединения определялись согласно [1-3]. В качестве опорных точек взяты: плотность при комнатной температуре и нормальном атмосферном давлении  $2165 \text{ кг/м}^3$  и плотность на пороге плавления при нормальном атмосферном давлении  $1991 \text{ кг/м}^3$ .

При давлении десятки-сотни кбар в щелочно-галлоидных кристаллах может проходить структурный фазовый В1-В2 переход [4]. Согласно выполненным нами расчетам [4] давление В1-В2 перехода у каменной соли достигает 138 кбар.

Высокое давление приводит к увеличению плотности материала до  $\rho_d$ . Как правило, относительное изменение объема  $\Delta V/V_0$  определяется приложенным внешним давлением  $p$  и модулем всестороннего сжатия  $K$ .

Для каменной соли с учетом табличных данных [5] при  $p = 138$  кбар будем иметь  $K = 565$  кбар,  $\Delta V/V_0 = 0.244$  и  $(\rho_d)_1 = 2865 \text{ кг/м}^3$ .

Когда в среде происходит В1-В2 переход, меняется тип решетки и возникает скачок  $\Delta V/V_0$  и  $\rho_d$ . [5]. Согласно данным [5] и нашим расчетам возникшая после структурного перехода В2 фаза хлорида натрия, после скачка  $\Delta V/V_0$  может иметь  $(\rho_d)_2 = 2930 \pm 30 \text{ кг/м}^3$ .

В случае дальнейшего увеличения нагрузки, после В1-В2 перехода при достижении давления в единицы-десятки мегабар может быть реализован переход диэлектрик-металл [6].

По нашим вычислениям у бесконечного кристалла хлорида натрия можно ожидать давления металлизации  $p_m = 15$  Мбар [3], а у полубесконечного кристалла при наличии поверхности – 9-10 Мбар [7]. Оценки других авторов дают для  $p_m$  значения порядка 1.5-2 Мбар [7].

Согласно нашей аппроксимации данных [8] по методике, предложенной в [2], при мегабарных давлениях у сжатого кристалла каменной соли будет  $(\rho_d)_3 = 4000 \pm 100 \text{ кг/м}^3$ . Подтверждением этому служат экспериментальные результаты в данной области давлений [5, 9].

В работе были рассчитаны давления на поверхности и в приповерхностном объеме в случае лучевого разрушения монокристаллов каменной соли фемтосекундными и наносекундными лазерными импульсами [10].

1. Таблицы физических величин / Под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
2. Воробьев А.А. Физические свойства ионных кристаллических диэлектриков. Кн. 1. Томск. Изд-во Томск. ун-та, 1960. 231 с.
3. Барабоскин А.Н. Электрокристаллизация из расплавленных солей. М.: Наука, 1976. 280 с.
4. Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И. // Доклады РАН. 2006. Т. 411. № 6. С. 762.
5. Воробьев А.А. Механические и тепловые свойства щелочно-галлоидных монокристаллов. М.: Высшая школа, 1968. 272 с.
6. Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И. // Доклады РАН. 2003. Т. 388. № 1. С. 41.
7. Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И. // Поверхность. 2004. № 2. С. 53.
8. Liu L., Bassett W.A. // J. Appl. Phys. 1973. V. 4. P. 1475.
9. Ударные волны и экстремальные состояния вещества / Под ред. В.Е. Фортова, Л.В. Альтшулера, Р.Ф. Трунина, А.М. Фунтикова. М.: Наука, 2000. 425 с.
10. Савинцев А.П., Гавашели Ю.О. // Доклады РАН. 2012. Т. 445. № 4.

**ГЕНЕРАЦИЯ ЖЕСТКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ  
ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ**

*Ромашевский С.А.\* , Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Овчинников А.В., Петровский В.П.,  
Чефонов О.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*sa.romashevskiy@gmail.com*

Работа посвящена экспериментальным исследованиям взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с интенсивностью излучения на образце  $\sim 10^{17} \div 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup> с различными твердотельными мишенями, включая мишени с наноструктурированной поверхностью. Представлены результаты измерений выхода характеристического рентгеновского излучения при использовании наноструктурированных мишеней и экспериментов по регистрации жесткого рентгеновского излучения в зависимости от величины наносекундного предимпульса.

Эксперименты выполнялись с помощью излучения мультитераваттной фемтосекундной титан-сапфировой лазерной системы на длине волны 800 нм, длительностью импульса  $40 \pm 5$  фс, энергией импульса до 250 мДж и частотой повторения 10 Гц. Взаимодействие лазерного излучения с мишенями осуществлялось в вакуумной камере, которая откачивалась вакуумной станцией с турбомолекулярным насосом до остаточного давления  $10^{-4}$  мм рт.ст. Диаметр пучка по уровню  $1/e$  составлял 15 мкм относительно максимума интенсивности. Регистрация спектров характеристического рентгеновского излучения в экспериментах осуществлялась с помощью фокусирующего кристаллического спектрометра, выполненного по схеме Гамоша. Для регистрации интегрального выхода непрерывного жесткого рентгеновского излучения в диапазоне энергий квантов от нескольких десятков кэВ до нескольких МэВ использовался сцинтилляционный детектор.

С помощью кристаллического спектрометра была исследована зависимость абсолютного выхода  $K_{\alpha}$  излучения в зависимости от типа мишени при облучении s-поляризованным лазерным излучением. Для исследований были использованы два типа мишеней: медная фольга толщиной 8 мкм и аналогичная фольга с наноструктурами на поверхности, которые представляли собой металлические столбики, диаметром 400 – 500 нм и высотой порядка 1 мкм. Анализ экспериментальных данных показывает, что выход характеристического рентгеновского излучения для мишеней меди с наноструктурированной поверхностью в два раза выше, чем для мишеней без наноструктур. С использованием рентгеновского детектора был исследован выход жесткого рентгеновского излучения в зависимости от интенсивности и контраста падающего лазерного импульса при разных углах наблюдения при взаимодействии лазерного излучения с массивной мишенью меди. Выход жесткого рентгеновского излучения по нормали мишени примерно в 2.5 раза превышает выход на углы близкие к поверхности мишени.

Таким образом в результате экспериментальных исследований установлено, что применение наноструктурированных мишеней может быть использовано для увеличения выхода характеристического рентгеновского излучения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов с высоким контрастом и умеренной интенсивности. Результаты экспериментов по регистрации жесткого рентгеновского излучения показали также, что при интенсивности лазерного импульса  $\sim 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup> роль наносекундного предимпульса становится существенной только при малых углах наблюдения относительно поверхности мишени, а в направлении по нормали мишени выход жесткого рентгеновского излучения практически не зависит от контраста лазерного импульса.

1. Shevelko A., Antonov A., Grigorieva I., Kasyanov Yu., Yakushev O., Knight L., Wang Q. X-Ray focusing crystal von Hamos spectrometer with a CCD linear array as a detector // *Advances in X-ray Analysis*. 2002. Vol. 45. P. 433–440.
2. Shevelko A., Kasyanov Yu., Yakushev O., Knight L. Compact focusing von Hamos spectrometer for quantitative x-ray spectroscopy // *Rev. Sci. Instrum.* 2002. Vol. 73. P. 3458–3463.
3. Shevelko A., Yakushev O., Knight L., Wang Q. Absolute X-Ray calibration of laser produced plasmas using a CCD linear array and focusing crystal spectrometer // *Proc. SPIE*. 2001. Vol. 4504. P. 215–226.

**АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОМОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ  
МЕТАЛЛА ПИКΟΣЕКУНДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ**

*Жильев П.А., Норман Г.Э., Саитов И.М., Стариков С.В.\* , Стегайлов В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*starikov@ihed.ras.ru*

В настоящей работе выполнено атомистическое моделирование плавления и абляции золота и алюминия при облучении металла фемто- и пикосекундными лазерными импульсами. Разработана атомистическая модель с явным учетом электронной подсистемы и зависимостью межйонного потенциала от электронной температуры. Использование такого потенциала позволяет учесть изменение физических свойств ионной подсистемы при нагреве электронной подсистемы. В частности, учитывается возникновение электронного давления при нагреве электронов. В используемой модели ионная подсистема описывается классической молекулярной динамикой, в то время как электронная подсистема рассматривается в приближении сплошной среды. Реализованный подход позволяет проводить классические расчеты, корректно учитывающие электронные свойства вещества и их изменение при эволюции системы.

Для золота обнаружено существенное различие между характеристиками абляции при разных длительностях лазерных импульсов. Для абляции при субпикосекундном импульсе удается выделить два различных механизма разрушения металла, связанных с эволюцией давления в системе. При энерговыкладах вблизи порогового значения, механизм абляции связан с релаксацией электронного давления. Поэтому абляция происходит сравнительно быстро (10 пс) в поверхностном слое глубиной около 10 нм. При более высоких энерговыкладах, как и при пикосекундных импульсах, механизм абляции связан с формированием и распространением волн сжатия и разгрузки. При этом механизме пространственные и временные масштабы абляции больше на порядок, чем при механизме, связанном с



релаксацией электронного давления. Для алюминия выделить два различных механизма затруднительно, однако роль электронного давления также велика. Пороговые значения энерговкладов при абляции в обоих металлах сравнимы и равны приблизительно  $50 \text{ мДж/см}^2$ .

## ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ КОМПОНЕНТОВ ТОПЛИВНЫХ СПЛАВОВ УРАН-МОЛИБДЕН МЕТОДАМИ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

*Смирнова Д.Е.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва,*

*d.e.smirnov@gmail.com*

Бинарные топливные сплавы системы уран-молибден (U-Mo) рассматриваются сейчас в качестве кандидатов для применения в реакторах на быстрых нейтронах. При низком содержании обогащенного урана сплавы с добавлением молибдена (в пределах от 7 до 12 масс.%) отличаются высокой плотностью, теплоемкостью, прочностью и коррозионной стойкостью [1,2]. Все перечисленные характеристики говорят о перспективности применения сплавов U-Mo в качестве ядерного топлива нового поколения. Однако для оценки эффективности их использования требуется получить как можно более полную информацию о большом наборе механических и теплофизических свойств.

Известно, что нагрев и облучение, которым топливные материалы подвергаются в “рабочих условиях” ядерных установок, приводят к изменениям микроструктуры топливного элемента, вызванным фазовыми переходами и образованием включений из продуктов деления – инертных газов, например, ксенона. В структуре топлива на атомистическом уровне зарождаются дефекты, способные к дальнейшей миграции и эволюции от точечных к более сложным конфигурациям. Соответствующие структурные изменения оказывают влияние на прочностные свойства топливного элемента и ведут к разрушению и к уменьшению срока его эксплуатации. Изучение диффузионных явлений, происходящих в ядерном топливе, также является важной задачей с точки зрения обеспечения контроля и безопасности соответствующих технологических процессов. Перераспределение компонентов топлива в процессе эксплуатации может приводить к локальному изменению теплофизических свойств и характеристик материала, например, к понижению температуры плавления и теплопроводности. Также может происходить локальное выгорание участков топливного элемента или понижение коррозионной стойкости.

Получение инструмента, который давал бы возможность предсказывать и анализировать описанные процессы, является одной из ключевых задач в области радиационного материаловедения. Таким инструментом может стать качественная молекулярно-динамическая модель. В настоящей работе выполняется построение атомистических моделей урана, молибдена и компонентов бинарной системы уран-молибден. Для решения задачи разрабатываются потенциалы, позволяющие описывать межатомное взаимодействие во всех указанных материалах. Потенциалы построены с помощью метода “согласования по силе” (force-matching method) в рамках модели погруженного атома. В качестве нормировочных данных при оптимизации потенциальных функций были использованы значения сил, энергий и напряжений, полученные из ab initio расчётов. Установлено, что предложенные потенциалы взаимодействия корректно воспроизводят структуру  $\alpha$ -U,  $\gamma$ -U, Mo, интерметаллида  $U_2Mo$  и сплавов U-Mo. Упругие постоянные, температуры плавления, тепловое расширение и “холодное сжатие” компонентов соответствуют экспериментальным значениям. Полученные энергии образования точечных дефектов (вакансий, межузельных атомов) в чистых U и Mo согласуются с результатами вычислений в рамках теории функционала плотности.

Потенциалы ориентированы на исследование механизмов образования и эволюции радиационных дефектов, на изучение фазовых переходов и на прогнозирование соответствующих изменений структуры и свойств топлив U-Mo. В частности, они были применены для построения молекулярно-динамических моделей, позволяющих прояснить особенности и оценить коэффициенты диффузии для точечных дефектов U и Mo в основном топливном сплаве U-10Mo, содержащем 10 масс.% молибдена.

1. Sinha V.P., Hegde P.V., Prasad G.J., Dey, G.K., Kamath H.S. // Journal of Alloys and Compounds 2010. V.506. №1. P.253.
2. Park J.-M., Kim K.-H., Kim C.-K., Meyer M.K., Hofman G.L., Strain R.V. // Metals and Materials International 2001. V.7. P.151.

## ПЕРВОПРИНЦИПНЫЙ РАСЧЕТ ПЕРЕНОСНЫХ СВОЙСТВ АЛЮМИНИЯ

*Князев Д.В.\* , Левашов П.Р.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва,*

*\*d.v.knyazev@yandex.ru*

Представленная работа посвящена первопринципному расчету переносных свойств (статической электропроводности и теплопроводности) плотной плазмы алюминия.

Расчет переносных свойств плотной плазмы металлов обладает как фундаментальной, так и практической ценностью. С фундаментальной точки зрения изучение переносных свойств является частью общих исследований свойств сильнонеидеальной плазмы. Практическое же применение переносных свойств металлов находят при моделировании различных экспериментов в области физики высоких плотностей энергии: фемтосекундного лазерного нагрева металлов, электровзрыва металлов, магнитогидродинамических явлений, воздействия на вещество пучков тяжелых ионов.

Расчеты, выполненные в данной работе, основаны на квантовом молекулярно-динамическом моделировании (КМД-моделировании), методе функционала электронной плотности и формуле Кубо-Гринвуда.

Атомы алюминия при заданной температуре и плотности помещаются в суперячейку с периодическими граничными условиями. Путем КМД-моделирования вычисляются ионные траектории в последующие моменты времени. В ходе КМД-моделирования на каждом шаге по времени производится расчет электронной структуры и вычисляются силы, действующие на ионы. С равновесного участка эволюции системы выбираются независимые ионные конфигурации для расчета переносных свойств.

Для каждой ионной конфигурации производится детальный расчет электронной структуры. При этом используются значения технических параметров (энергии обрезания, числа зон), приводящие к более точным результатам,

чем при КМД-моделировании. Расчет электронной структуры и КМД-моделирование выполняются с помощью вычислительного пакета VASP [1]. Полученные волновые функции используются для расчета матричных элементов оператора скорости.

Динамические коэффициенты Онзагера вычисляются по формуле Кубо-Гринвуда [2,3] с использованием собственных значений энергии, волновых функций и чисел заполнения, полученных при детальном расчете электронной структуры. Значения динамических коэффициентов Онзагера, рассчитанные для различных ионных конфигураций, усредняются. Статические коэффициенты Онзагера вычисляются путем экстраполяции динамических к нулевой частоте. Теплопроводность выражается через статические коэффициенты Онзагера.

В данной работе произведены расчеты переносных свойств алюминия при плотностях, близких к нормальной и температурах от температуры плавления до 20 кК.

Результаты расчета на нормальной изобаре при температурах от 1000 К до 1500 К сопоставлены со справочными данными [4]. Произведена оценка погрешности расчета. При оценке погрешности учитывались сходимость результатов по энергии обрезания, числу ионных конфигураций, зависимость от числа атомов, использованного псевдопотенциала, обменно-корреляционного функционала, уширения  $\delta$ -функции в формуле Кубо-Гринвуда.

Результаты расчета на изохоре  $\rho = 2,35 \text{ г/см}^3$  при температурах от 1 кК до 10 кК сопоставлены с экспериментальными данными [5] и расчетами других авторов [3].

Также произведены расчеты переносных свойств алюминия на нормальной изохоре при температурах от 3 кК до 20 кК.

1. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 47. P. 558–561.
2. Chester G.W., Thellung A. // Proc. Phys. Soc. London. 1961. Vol. 77, no. 5. P. 1005–1013.
3. Recoules V., Crocombette J.-P. // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 104202.
4. Физические величины // Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
5. Rhim W.-K., Ishikawa T. // Rev. of Sci. Instrum. 1998. Vol. 69, no. 10. P. 3628–3633.

## ИЗМЕРЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ ОКСИДА КАЛЬЦИЯ.

*Вервикишко П.С.\*, Васин А.В., Шейндлин М.А.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*miptbusiness@gmail.com*

Не смотря на большой объем экспериментальных данных по теплофизическим свойствам тугоплавких оксидов, температура плавления ряда из них, в частности температура плавления оксида кальция, до сих пор не определена с достаточной точностью [1]. Разброс данных составляет сотни кельвинов: от 2887 К [2] до 3223 К [3]. Традиционные методы измерения температуры плавления, основанные на применении печи сопротивления с нагревом вещества в тигле, приводят к непредсказуемым ошибкам, вызванным взаимодействием материала тигля (как правило, вольфрама) и CaO [1,2].

Использованный в [3] нагрев в солнечной печи позволяет избежать изменения химического состава исследуемого вещества в процессе эксперимента. Однако существенным недостатком данного метода является то, что он основан только на наблюдении затвердевания поверхности образца после отключения нагрева: оптические измерения в ходе нагрева не представляются возможными. Нами использовался метод лазерного нагрева, обладающий несомненными преимуществами как по возможности управления темпом нагрева и охлаждения, так и по реализации различных методов оптических измерений [4].

В работе приведены результаты экспериментов по определению температуры плавления оксида кальция, результаты исследования направленно-полусферического коэффициента отражения CaO при комнатной температуре методом Фурье спектроскопии. Получены данные по величине излучательной способности CaO как в твердом, так и в жидком состоянии в окрестности температуры плавления на основе спектрального анализа теплового излучения.

[1] Melting Temperatures of refractory oxides. Pure and Appl. Chem., V.54., No 3, pp. 604, 681-688, 1982.

[2] C.W.Kanolt, Bull.B.S. 10, 295/1914/; also Z.Anorg.Chem.85,1 1914

[3] J.P.Traverse and M.Foex, High Temp.-High Pressures 1, 409, 1969

[4] C.Ronchi, M.Sheindlin. Melting point of MgO/ Journal of applied physics, V.90, №7.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛАСТИ ПРИМЕНИМОСТИ ТЕПЛОВОЙ ЧАСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В МОДЕЛИ ТОМАСА-ФЕРМИ

*Дьячков С. А.\*, Левашов П. Р.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*seppera@gmail.com*

При использовании конечно-температурной модели Томаса-Ферми [1] для расчета термодинамических функций электронов в области низких температур становится существенным вклад квантовомеханических и обменных поправок [2], вследствие чего модель перестает корректно отражать физическую реальность.

Известно, однако, что квантовые эффекты наиболее сильно проявляются при нулевой температуре. Следовательно, если вычесть из термодинамических функций их значения при нулевой температуре, можно ожидать, что область применимости оставшейся тепловой части значительно расширится. Тем не менее, необходимо уточнить, при каких условиях это действительно имеет место.

В данной работе будет определена область температур и плотностей, в которой использование модели Томаса-Ферми для тепловой части термодинамических функций оправдано. Это будет сделано, аналогично работе [3], посредством сравнения теплового вклада в термодинамические функции с тепловым вкладом в поправки к этим функциям.

1. Feynman R. P., Metropolis N., Teller E. Equations of state of elements based on the generalized Fermi-Thomas theory // Phys. Rev. 1949. V.75. №10. P.1561–1573.

2. Kirzhnits D. A. Quantum corrections to the Thomas-Fermi equation // JETP. 1957. V. 32 №1. P. 115–123.
3. Kirzhnits D. A., Lozovik Y. E. and Shpatkovskaya G. V. // 1975 Sov. Phys. Usp. V. 117 №1. P. 3-47

## ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ КАРБИДА ЦИРКОНИЯ.

*Фалыхов Т.М.\* , Васин А.В., Шейндлин М.А.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*tfalyakhov@gmail.com*

Исследование фазовых диаграмм сверхтугоплавких соединений в области высоких температур представляет большой интерес в связи с разработкой и созданием новых видов теплозащитных материалов [1]. Крайне высокие температуры плавления таких соединений осложняют или делают невозможным применение классических методов измерения в тиглях. Используемый нами метод лазерного нагрева обладает несомненными преимуществами: отсутствие загрязнения образца материалом тигля, возможность управления темпом нагрева и охлаждения, доступность различных методов оптических измерений [2].

Последние данные по температуре плавления карбида циркония, представленные в работе [3], хотя и были получены методом лазерного нагрева, нуждаются в уточнении в связи с отсутствием достоверных данных по излучательной способности ZrC.

В работе приведены результаты экспериментов по определению температуры плавления карбида циркония; получены данные по величине излучательной способности ZrC как в твердом, так и в жидком состоянии в окрестности температуры плавления на основе спектрального анализа теплового излучения.

1. E. Wuchina, E. Opila, M. Opeka, W. Fahrenholtz, and I. Talmy, UHTCs: Ultra-High Temperature Ceramic Materials for Extreme Environment Applications / Electrochem. Soc. Interface, pp.30-36 (winter 2007).
2. C. Ronchi, M. Sheindlin, Melting point of MgO / Journal of Applied Physics, vol.90 num.7.
3. Heather F. Jackson, Daniel D. Jayaseelan, Dario Manara, Carlo Perinetti Casoni and William E. Lee, Laser Melting of Zirconium Carbide: Determination of Phase Transitions in Refractory Ceramic Systems / J. Am. Ceram. Soc., 94 [10], pp.3561–3569 (2011).

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛАСТЕРНОЙ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ НА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРАХ

*Быстрый Р.Г.\* , Морозов И.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*broman.meld@gmail.com*

Для теоретического исследования неидеальной плазмы широко применяется метод молекулярной динамики (МД). Он позволяет на уровне движения электронов и ионов исследовать элементарные процессы в плазме, такие как плазменные волны, электрон-ионная релаксация, взаимодействие излучения с плазмой и др. [1]. В то же время метод МД предъявляет высокие требования к производительности вычислительных систем и эффективности распараллеливания программ моделирования. В наибольшей степени на скорость работы программ влияют число частиц в системе, реалистичность модели взаимодействия частиц и объем статистического усреднения.

В настоящей работе метод МД применяется для описания неидеальной плазмы, образующейся при ионизации металлических нанокластеров короткими лазерными импульсами [2,3]. Для описания электрон-ионного взаимодействия используется потенциал [2], который обеспечивает учет квантово-механических эффектов на коротких расстояниях.

Основной особенностью кулоновской части потенциала является то, что она медленно убывает с ростом расстояния между частицами. Такие потенциалы называются дальнедействующими. Для систем с дальнедействующим потенциалом неприменим метод списка ближайших соседей, используемый традиционно для короткодействующих потенциалов. Это делает задачу вычислительно тяжелой даже для сравнительно небольшого числа частиц в системе. Кроме того, необходимость знать координаты всех частиц системы для вычисления силы, действующей на одну частицу, делает неэффективным стандартный метод распараллеливания МД программ (декомпозиция по пространству), применяемый на системах с распределенной памятью. В этом случае графические процессоры (GPU — Graphic Processor Unit) с общей памятью позволяют использовать декомпозицию по частицам, что является более эффективным [4].

Основной целью работы было исследование влияния размерных эффектов на частоту и затухание электронных колебаний. Нами была реализована GPU-реализация потенциала электрон-ионного взаимодействия. С помощью полученной программы исследовалась динамика электронов в наноразмерных кластерах натрия, ионизованных фемтосекундным лазерным импульсом. Были рассчитаны молекулярно-динамические траектории для набора микросостояний при каждом из выбранных размеров кластеров. Вычисление траекторий для различных микросостояний происходило параллельно на отдельном ускорителе. Записанные на диск траектории движения частиц использовались для вычисления автокоррелятора тока с последующим усреднением. Получены Фурье образы автокорреляторов тока при различных размерах кластеров.

Аналогичные расчеты на центральных процессорах ранее удавалось провести только для кластеров из не более чем 2000 атомов. При этом главные моды колебаний в маленьких кластерах, соответствующие максимумам на Фурье образе коррелятора тока, существенно отличались от теоретических значений, полученных в предположении пространственной однородности плазмы.

Применение GPU позволило в 100 раз увеличить быстродействие программы моделирования ионизованных нанокластеров, что в свою очередь, позволило существенно увеличить число частиц, проследить плавный переход от малых к более крупным кластерам и воспроизвести предельное значение для однородной плазмы. Также были исследованы ленгмюровские плазменные колебания, не наблюдавшиеся в малых кластерах при расчетах на центральных процессорах.

1. Морозов И.В., Норман Г.Э. // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. №2. С. 412.
2. M. Belkacem, F. Megi, P.-G. Reinhard, E. Suraud, G. Zwicknagel // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. P. 051201R.

3. T. Raitza, H. Reinholz, G. Repke, I. Morozov, E. Suraud // Contributions to Plasma Physics. 2009. V. 49. P. 496.
4. I.V. Morozov, A.M. Kazennov, R.G. Bystryi, G.E. Norman, V.V. Pisarev, V.V. Stegailov // Comput. Phys. Commun. 2011. V. 182. P. 1974.

## О ЯДЕРНОМ DD СИНТЕЗЕ В СХЕМЕ С ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИМ УДЕРЖАНИЕМ НА ОСНОВЕ НАНОСЕКУНДНОГО ВАКУУМНОГО РАЗРЯДА С Pd АНОДОМ

Куриленков Ю.К.<sup>\*1</sup>, Гуськов С.Ю.<sup>2</sup>, Тараканов В.П.<sup>1</sup>, Шевелева Е.Е.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, <sup>2</sup>ФИАН, <sup>3</sup>ИОХ РАН, Москва,

\*yukurilenkov@rambler.ru

Недавно были продемонстрированы экспериментально появление быстрых ионов и ядерный DD синтез в межэлектродной среде наносекундного вакуумного разряда (НВР) с дейтерированным палладиевым анодом [1]. Чтобы понять лучше физику процессов ядерного синтеза, было выполнено моделирование эксперимента методом частиц (PIC) с помощью электродинамического кода KARAT. Оно выявило принципиальную роль формирования виртуального катода (ВК) и соответствующей ему потенциальной ямы (ПЯ) в комплексной прианодной плазме [2]. Потенциальная яма как удерживает, так и ускоряет ионы дейтерия (до энергий в десятки кэВ), и встречные столкновения быстрых дейтронов на оси разряда приводят к ядерному DD синтезу, сопровождающемуся однократным или многократным (пульсирующим) выходом нейтронов. Наличие квазистационарной ПЯ в межэлектродном пространстве превращает его в своего рода ядерный микрореактор [3]. Благоприятный скэйлинг плотности мощности ядерного синтеза (в используемой схеме удержания [4]), которая заметно возрастает с уменьшением радиуса ВК и увеличением глубины потенциальной ямы, позволяет получить именно в миниатюрном НВР большую эффективность синтеза. Отметим, что эрозия дейтерированного Pd анода может обеспечить частичное заполнение ПЯ дейтериевыми кластерами (межэлектродные ансамбли). Частичное или полное запираение дейтронов ансамблями кластеров, наблюдаемое в эксперименте, может заметно увеличить нейтронный выход (до  $10^7/4\pi$ ) [1,2] (для увеличения плотности кластеров в ансамблях обсуждается эксперимент с добавлением в анодную область малоплотного микро-ячеистого дейтерополиэтилена). Кроме того, помимо малых геометрий самого разряда, представляет интерес и предельный случай уменьшения радиусов ВК до микро- и наноразмеров. Возможно, он может быть реализован на самой начальной стадии разряда при взаимодействии пучка электронов (с энергией 50 кэВ) со сложной и неоднородной поверхностью дейтерированного Pd анода (синтез в порах, микротрещинах, дислокациях и т.п.) [3]. При этом такая рабочая поверхность дейтерированного Pd анода, периодически бомбардируемого электронным пучком, потенциально может представлять собой интегрированный многоканальный микрореактор.

1. Yu.K. Kurilenkov, M. Skowronek and J.Dufty. J.Phys.A:Math Gen 39 4375 (2006); Plasma Physics Reports, 36, No. 13 (2010) 1219-1234.
2. Yu.K. Kurilenkov, V.P.Tarakahov, S.Yu.Gus'kov et al. J.Phys.A: Math Theor 42 214041 (2009); V.P.Tarakanov. User's Manual for Code KARAT ( BRA Inc., Va, USA, 1992).
3. Yu.K. Kurilenkov, V.P.Tarakanov et al. Contrib. Plasma Phys. 51, No. 5, 427 – 443 (2011)
4. R.A. Nebel and D.C. Barnes, Fusion Technology 38, 28 (1998); J. Park, R.Nebel et al. Physics of Plasmas 12 (2005) 05631.

## ГАЗОДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ДЫХАНИЯ

*Фомин В.М.*

*ИТПМ СО РАН, Новосибирск,*

*fomin@itam.nsc.ru*

В последнее время разрабатываются различные способы доставки лекарств в нужное место, чтобы эффективность его воздействия была оптимальной. С появлением нанотехнологий существенно увеличилось число способов доставки лекарств. Одним из существующих способов является хорошо известный в литературе и жизни метод доставки лекарственных средств в лёгкие в виде твёрдых частиц или жидких капель. Современные ингаляторы имеют целый ряд недостатков, включая большой размер частиц ( $1 \div 5$  мкм).

В результате проведённых экспериментов под руководством академика В.В.Болдырева установлено, что частицы диаметром  $d \sim 10 \div 20$  мкм осаждаются в альвеолярной части лёгких человека и их действие наиболее эффективно.

Для того, чтобы изучить весь процесс осаждения частиц по тракту дыхания, необходимо иметь математическую модель процесса дыхания человека. Следует заметить, что некоторые аспекты процессов дыхания разрабатывались, но общей математической модели пока нет. Показано, как автор подходит к решению этой, достаточно трудной, проблемы и какие проблемы им решены.

Используя данные томографических исследований носовых полостей различных людей и графический пакет "Grapher 5", построена трёхмерная математическая модель носового тракта. Следует заметить, что одинаковых по геометрическим характеристикам носовых полостей нет, и поэтому имеет смысл говорить только о средних характеристиках пропускной способности для различных людей. Для описания течения воздуха в носовых полостях использовались уравнения Навье-Стокса с  $K-\omega$  моделью турбулентного замыкания. На боковых поверхностях ставились условия прилипания для скорости и изотермической стенки для температуры. На входе и выходе дыхательного тракта задавался перепад давления. Разностная сетка гибридная, не структурированная. Максимальное число узлов  $6 \cdot 10^6$ . Численное решение построено по неявной схеме методом установления с использованием коммерческого пакета программ "Fluent". В результате численного моделирования построены поля течений в верхних дыхательных путях для различных людей и режимах дыхания.

Создана технология, которая позволяет хирургу использовать результаты виртуальной операции на математической модели перед хирургическим вмешательством.

Расчёты показали, что в патологических случаях прогрев воздуха в носовой полости значительно слабее, что может приводить к различным заболеваниям. Течение воздуха в носоглотке, глотке и трахее при вдохе представляет собой закрученный поток с образованием вихрей различной интенсивности. Количество и интенсивность вихрей определяется профилем скорости в хоане, который зависит от реальной геометрии носовых полостей.

Дано объяснение понятию «пустого» носа, и почему при этом трудно дышать человеку.

Намечены различные подходы к математическому моделированию всего процесса дыхания.

## ОСОБЕННОСТИ ДИФФУЗИИ В ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ

*Норман Г.Э.\* , Ивановский Г.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва,*

*\*norman@ihed.ras.ru*

Ионные жидкости – новый класс органических соединений, имеющих ряд перспективных приложений. Существенную роль при этом играют процессы диффузии ионов. Методом молекулярной динамики исследована диффузия в ионных жидкостях на примере тетрафторбората 1-бутил-3-метилимидазолия ( $[bmim]^+[BF_4]^-$ ). Исследованы диффузионные и стохастические свойства при комнатных температурах. Для вычисления коэффициентов диффузии, наряду с прямым расчетом среднего квадрата смещения частиц, предложено использовать разбегание траекторий на больших временах. Найдено, что участок выхода среднего квадрата смещения частиц на диффузионный режим сильно затянут (до 0.5 нс) по сравнению с Леннард-Джонсовской системой. На этом участке можно выделить два линейных участка с большими коэффициентами диффузии. Обнаружено существование нескольких участков с линейной зависимостью среднего квадрата смещения от времени с последовательным уменьшением коэффициента диффузии. Различие коэффициентов диффузии катионов и анионов достигает 30% в пользу катионов, несмотря на большие размеры и массу. Как уже замечалось в других работах, значительную роль играет пространственное распределение заряда. Продемонстрирована необходимость усреднения не только по частицам, но и по нескольким независимым траекториям для получения надежных результатов.

СУБЛИМАЦИЯ КРИСТАЛЛА, ЗАТОРМОЖЕННАЯ СОРБЦИЕЙ ИНОРОДНЫХ МОЛЕКУЛ ИЗ ГАЗОВОЙ СРЕДЫ

Бочкарев А.А.\* , Полякова В.И.

ИТ СО РАН, Новосибирск-90,

\*anaboch@itp.nsc.ru

Известно, что присутствие газовой среды вблизи сублимирующей поверхности снижает скорость сублимации. Обычно это объясняется тем, что сублимированный пар распространяется в газовую среду по диффузионному механизму. Формируется диффузионный слой, который создает вблизи поверхности повышенную концентрацию молекул пара. Обратный поток молекул пара из диффузионного слоя на сублимирующую поверхность снижает итоговую скорость сублимации. В этом объяснении никак не учитываются молекулярная структура сублимирующей поверхности и молекулярные процессы, которые имеют место на ней. Чтобы выявить роль этих факторов было проведено численное моделирование сублимации первоначально идеальной поверхности кристалла водяного льда. Физические аспекты моделирования основаны на модели сорбции Ленгмюра [1]. Численные расчеты проводились упрощенным методом Монте-Карло. Примеры успешного использования такого подхода имеются в [2]. В конкретных расчетах сублимации один молекулярный слой ледяного кристалла испарялся в вакууме в течение 2,4 мкс. В присутствии атмосферы условного газа скорость сублимации существенно снижается. При потоке молекул газа, в 16,5 раз превышающем поток молекул воды на кристалл в равновесных условиях, скорость сублимации уменьшалась в 5 раз. Выявлена причина торможения сублимации – адсорбция молекул газа на поверхности кристалла заполняет вакансии адсорбции, освобождающиеся при сублимации, и тем самым препятствует формированию островков пустых вакансий на поверхности кристалла, необходимых для испарения поверхностного молекулярного слоя. В зависимости от плотности потока молекул газа на поверхность кристалла найдены три характерных режима сублимации: когда адсорбция молекул газа тормозит развитие островков пустых вакансий, когда адсорбция вообще не позволяет формироваться островкам вакансий, когда реализуется многослойная адсорбция и сублимация блокируется полностью. Показано, что кроме плотности потока молекул газа на поверхность кристалла ключевыми параметрами, влияющими на скорость сублимации, являются энергии связи молекул газ-газ, газ-вода. Результаты исследований дополняют известное объяснение торможения сублимации диффузионным слоем, формирующимся вблизи сублимирующей поверхности, тем, что молекулярные процессы на поверхности кристалла играют не менее важную роль, чем диффузионный слой. Помимо уточнения теории сублимации результаты полезны для разработки методов управления сублимацией. Обнаружены также случаи, когда сорбция молекул газа ускоряет сублимацию кристалла.

Langmuir I. The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum  
 J. Amer. Chem. Soc. 1918. V.40. P.1361–1403. Бочкарев А.А., Полякова В.И.. Процессы формирования микро- и нанодисперсных систем. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2010.

ОЦЕНКА СВОЙСТВ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ И ОКСИДА ЦИРКОНИЯ

Губин С.А.\*, Маклашова И.В., Мельникова К.С.

МИФИ, Москва,

\*sagubin@mephi.ru

Композиционные материалы, содержащие в своем составе оксиды алюминия или циркония, обладают уникальным комплексом свойств: высокой температурой плавления, стойкостью к коррозии, износу, низкой теплопроводностью, высокой прочностью. Комбинируя объемное содержание компонентов в композите, можно, в зависимости от назначения, получать материалы с требуемыми значениями специальных свойств. Для конструирования деталей и изделий из оксидных композитов необходимо уметь рассчитывать теплофизические, термодинамические и механические свойства этого материала в широкой области давлений и температур, включая критические (нестандартные) условия эксплуатации, а также экстремальные состояния, реализуемые при аварийных ситуациях. В настоящее время отсутствуют уравнения состояния УРС и экспериментальные данные необходимые для получения УРС композитов, но имеются экспериментальные данные (ударные адиабаты) индивидуальных компонентов, входящих в их состав. Это и дает возможность получить УРС и разработать модель композитов на основе известных УРС индивидуальных компонентов. В работе были получены УРС для каждого входящего в композит вещества: твердой фазы оксида алюминия  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  и моноклинной фазы диоксида циркония  $\text{ZrO}_2$ . На основе полученных УРС индивидуальных компонентов становится возможным нахождение УРС двухкомпонентных композитов, состоящих из рассматриваемых оксидов. Энергия Гельмгольца двухкомпонентного композита с неаддитивным (неидеальным) взаимодействием описывается соотношением

$$F(V, T, x) = xF_1(V, T) + (1 - x)F_2(V, T) + \Delta F(V, T, x)$$

Здесь  $F_1(V, T)$  - свободная энергия Гельмгольца для первого и  $F_2(V, T)$  - для второго компонентов композита,  $x$  - концентрация первого компонента. Вид функций  $F_1(V, T)$  и  $F_2(V, T)$  определяется для каждого компонента на основе найденных в настоящей работе УРС по методике [1-2]. Третье слагаемое  $\Delta F(V, T, x)$  характеризует изменение свободной энергии Гельмгольца композита благодаря образованию особой структуры материала, в которой частицы компонентов прочно соединены между собою слоями материала образованного взаимной диффузией компонентов. Такая модель, как бы, учитывает образование нового «третьего» компонента композита вследствие взаимной диффузии веществ по границам контактов спекаемых частиц. Для нахождения параметра «неидеальности» материала  $\Delta F(V, T, x)$  надо использовать экспериментальные данные. В первом приближении можно считать третье слагаемое (неидеальное взаимодействие) в УРС равным постоянной величине при заданном соотношении компонентов в композите. Такое упрощение модели возможно благодаря относительно невысокой массовой доли вещества с особыми свойствами, обусловленными взаимной диффузией компонентов в массе всей керамики. Все термодинамические, теплофизические и упруго-механические свойства двухкомпонентного композита находятся частным дифференцированием УРС. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показывает применимость предложенной модели двухкомпонентного композита для предсказания теплофизических и механических свойств этих материалов в широкой области давлений и температур. Необходимо отметить, что предложенная модель не учитывает влияния технологии производства и реальной структуры композита на его свойства.

1. Молодец А.М. // ФГВ. 1995. Т.31. №5. С.132-133.
2. Молодец А.М. // ЖЭТФ. 1995. Т.107. №3. С.824-832.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОРБЦИИ ГЕЛИЯ МИКРОСФЕРАМИ С УЧЕТОМ ИХ НЕРАВНОМЕРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО РАЗМЕРАМ И ПРОНИЦАЕМОСТИ

Верещагин А.С.\*, Фомина А.Ф., Фомин В.М.

ИТПМ СО РАН, Новосибирск,

\*vereshchag@itam.nsc.ru

Полые стеклянные микросферы являются мембранами с высокой проницаемостью к легким газам (гелий, водород) и низкой – к тяжелым (азот, аргон, метан), обладая при этом высокой селективностью, и поэтому представляют интерес для исследования [1].

Одним из важных параметров полых стеклянной микросферы является коэффициент проницаемости стенки, который измеряют с помощью следующей процедуры. В реактор при определенной температуре засыпают сорбент, который представляет собой микросферы, ценосферы или композитный сорбент на их основе. Происходит откачка газ из системы и в определенный момент исследуемый газ подается в систему, заполняя весь свободный объем до определенного давления. В следствии проницаемости стенки газ диффундирует внутрь микросферы. Из сравнения скорости падения давления в эксперименте и построенной математической модели вычисляются коэффициенты проницаемости. Самой простой математической моделью представляется та, в которой все частицы считаются одинаковыми, которая дает экспоненциальное падение давления [2].

Однако не всегда есть возможность получить однородный сорбент по размерам и коэффициентам проницаемости (например, при травлении поверхности ценосфер [3]).

В данной работе производится построение математической модели сорбции гелия микросферами с учетом их неравномерного распределения по геометрическим и сорбционным параметрам. Полученная математическая модель имеет вид

$$M_1(t) = M_0 - \int_0^t M_1(\tau)G(t - \tau)d\tau, \quad G(x) = \int_0^\infty \beta p(\beta)e^{-\beta x}d\beta, \quad (1)$$

с начальными условиями

$$M_1(0) = M_0, \quad (2)$$

где  $t$  – время;  $M_1(t)$  – масса гелия в свободном объеме системы во время  $t$ ;  $M_0$  – суммарная масса гелия в системе;  $\beta$  – приведенный коэффициент проницаемости микросферы;  $G(x)$  – ядро интеграла в модели сорбции;  $p(\beta)$  – плотность распределения внутреннего объема частицы.

Также в работе получены коэффициенты проницаемости двух типов сорбентов на основе известных распределений по размерам: искусственных микросфер и модифицированных цеолитов.

1. Верещагин А.С. Стекланные шарики для солнечного газа // Наука из первых рук. – 2010. – Т. 5. – С. 32-37.
2. Оценка коэффициента проницаемости стенок микросфер / А.С. Верещагин, В.Н. Зиновьев, В.М. Фомин и др. // Вестник НГУ. Серия: Физика. – 2010. – Т. 5, № 2. – С. 8-16.
3. Гелиевая проницаемость микросферических мембран на основе муллитизированных цеолитов / Е. В. Фоменко, Н. Н. Анпиц, М. В. Панкова и др. // Доклады Академии наук. – 2010. – Т. 435, № 5. – С. 640-642.

## ИЗУЧЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИФФУЗИИ В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

*Андрющенко В.А.\* , Рудяк В.Я.*

*ИТ СО РАН, Новосибирск-90,*

*\*vladimir.andryushchenko@gmail.com*

Процессы переноса в пористых средах играют огромную роль в повседневной жизни человека и в различных технологических процессах. Важнейшими примерами таких процессов являются: теплообмен в живых организмах, движение влаги в почве, осаждение примесей на фильтрах очистных сооружений, ускорение реакций пористыми катализаторами, движение углеводородов в коллекторах и т.д. Ключевым процессом переноса является диффузия молекул флюида. Очевидные трудности экспериментального исследования диффузии в пористых средах делают естественным использование для этой цели метода молекулярной динамики. В средах с нанометровым размером пор этот метод, на сегодняшний день, является фактически единственным адекватным методом моделирования процессов переноса.

Целью данной работы являлось молекулярно-динамическое моделирование процессов самодиффузии и диффузии молекул флюида в пористых средах, а также построение кинетической модели позволяющей описывать эти процессы. Пористая среда моделировалась регулярной засыпкой сферических частиц равных и различных диаметров. Были реализованы алгоритмы генерации трех типов упаковок частиц: кубической, кубической объемноцентрированной и кубической гранецентрированной. Кроме процесса диффузии моделировался процесс разделения суспензии пористой мембраной. Для упаковок, задавалась пористость и размер частиц. Пористость варьировалась от пяти до девяноста процентов. Характерный размер пор изменялся в диапазоне от нескольких нанометров до нескольких сотен нанометров. Практически во всех случаях исследовалась диффузия молекул плотного, либо умеренно плотного газа. Были получены зависимости коэффициента самодиффузии от пористости, характерных размеров пор и плотности флюида, а также было показано, что диффузия молекул флюида в пористой среде не является изотропной. Также исследовалась структура флюида в пористой среде. При моделировании переноса молекул в пористой мембране, была проиллюстрирована возможность эффективного управления процессом разделения суспензий, посредством изменения свойств мембраны. Найдены зависимости скорости разделения суспензии от концентрации, плотности и размера частиц дисперсной компоненты флюида, плотности несущей компоненты флюида, характерных размеров пор и толщины мембраны, а также определены критические размеры горловин пор, позволяющие осуществлять разделение смеси.

Построена кинетическая модель диффузии, которая дает достаточно простые формулы для описания самодиффузии молекул флюида в пористых средах, а также взаимной диффузии, в том числе, диффузии наночастиц, погруженных во флюид.

## НЕЛИНЕЙНОЕ РЕЗОНАНСНОЕ УПРАВЛЕНИЕ ПЕРЕСЕКАЮЩИМИСЯ СВЕТОВЫМИ ПОТОКАМИ (КОНЦЕПЦИЯ ТУННЕЛЬНО-РЕЗОНАНСНОГО ФОТОННОГО НАНОТРИОДА)

*Жаров А.А.<sup>1</sup>, Смирнова Д.А.<sup>1</sup>, Смирнов А.И.\*<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>ИФМ РАН, <sup>2</sup>ИПФ РАН, Нижний Новгород,*

*\*smirnov@appl.sci-nnov.ru*

Создание линейных и нелинейных оптических устройств, обеспечивающих локализацию света и управление световыми потоками, чрезвычайно важно для перспективных приложений в интегральных оптических цепях [1,2]. Наибольший интерес с точки зрения будущих приложений представляет достижение полностью оптического контроля фотонных потоков на нанометровых масштабах, сравнимых с размерами современных полупроводниковых устройств. Это сделало бы возможным переход от электронных и оптоэлектронных систем к полностью оптическим схемам, которые обладают большим быстродействием.

В данной работе развивается концепция так называемого туннельно-резонансного фотонного нанотриода, принцип действия которого базируется на эффекте сильного резонансного взаимодействия фундаментальной квазилокализованной (туннельным образом излучающей) собственной ТЕ моды тонкого нелинейного планарного диэлектрического нановолновода с падающим на этот волновод когерентным световым пучком. Рассматриваемая ТЕ мода имеет достаточно высокую радиационную добротность и может возбуждаться, во-первых, источником, создающим на входе в систему управляющую волну, и, во-вторых, падающим на волновод фазово-согласованным световым пучком. При резонансном взаимодействии управляющей волны со световым пучком даже малые нелинейные расстройки фазового синхронизма способны перевести рассматриваемую бистабильную систему из одного устойчивого состояния равновесия в другое. Именно с этой бистабильностью и связаны сильные изменения мощности в прошедшем и отраженном пучках при малых изменениях входной интенсивности управляющей волны [3]. Другими словами, подобно вакуумному триоду в предельно слабой системе посредством слабой модуляции входной амплитуды управляющей волны (по аналогии с «напряжением на сетке») осуществляется управление фотонными потоками в канале проходящего волнового пучка (играющего роль «анодного тока»).



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №11-02-00531, 11-02-97058) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (госконтракт № П560).

1. V. M. Menon, L. I. Deych, and A. A. Lisyansky, "Nonlinear optics: Towards polaritonic logic circuits," Nat. Photon. 4, 345–346 (2010).
2. D. A. B. Miller, "Are optical transistors the next logical step?" Nat. Photon. 4, 3–5 (2010).
3. A. A. Zharov, D. A. Smirnova, and A. I. Smirnov, "Nonlinear resonant control of cross-cut photonic flows," J. Opt. Soc. Am. B 29, 443-449 (2012)

## **ФИЗИКА МИКРО- И НАНОТЕЧЕНИЙ: СОСТОЯНИЕ, ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ**

*Рудяк В.Я.*

*ИТ СО РАН, Новосибирск-90,*

*valery.rudyak@mail.ru*

Микротечения давно привлекали внимание исследователей, что было связано в первую очередь с изучением течений в пористых средах, в различных системах живой и неживой природы. Бурный интерес к ним в последние два десятилетия мотивирован появлением большого числа микроэлетромеханических систем (МЭМС). С развитием нанотехнологий различного назначения стали активно изучаться и нанотечения. Широкие приложения появляются в медицине, фармакологии, биологии, теплоэнергетике, в приборостроении, катализе и т.д. Данная тематика имеет, однако, и важную фундаментальную составляющую, поскольку в большинстве случаев течения данного класса не описываются традиционными методами, а флюиды на микро и в особенности на наномасштабах проявляют необычные свойства.

Сложность экспериментального изучения данных течений вполне очевидна и существующая экспериментальная информация достаточно ограничена, а часто и противоречива. С другой стороны, начиная с некоторых масштабов, их нельзя описывать в рамках классической гидродинамики. Необходимо привлекать методы молекулярного моделирования. Фактически здесь имеет место описание на трех различных уровнях: макроскопическом, микроскопическом и мезоскопическом, который до сих пор фактически не исследовался. В данной работе сделан обзор, с одной стороны, имеющихся подходов и достижений в изучении указанных течений, а с другой, обсуждаются проблемы, как теоретического, так и экспериментального характера, решение которых настоятельно необходимо. В частности, анализируются и обсуждаются: (i) технологические применения, приведшие к развитию этой области физики жидкости; (ii) необычность свойств течений на микро- и наномасштабах; (iii) методы описания данных течений; (iv) гидродинамическое описание микромиксеров; (v) границы применимости гидродинамического описания; (vi) новые технологии моделирования микротечений методом молекулярной динамики; (vii) молекулярно-динамическое и стохастическое моделирование процессов переноса в пористых средах.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 10-01-00074) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг.» (Госконтракт 14.740.11.0103).

## **Механика, процессы переноса, флуктуации и необратимость**

*Рудяк В.Я.*

*ИТ СО РАН, Новосибирск-90,*

*valery.rudyak@mail.ru*

В этом году исполнилось 140 лет со дня формулирования Людвигом Больцманом его знаменитой Н-теоремы и кинетического уравнения разреженного газа. Стало ясно, что можно построить теорию, описывающую эти процессы и явления, исходя из микроскопического строения систем, как сейчас принято говорить, из первых принципов. Основы такой теории были заложены Максвеллом, Больцманом и Гиббсом и сегодня носят название статистической механики. Несмотря на ее блестящие успехи, статистическая механика внутренне противоречива, поскольку описывает необратимое термодинамическое поведение систем многих частиц посредством обратимой гамильтоновой механики. Противоречие это много раз объявлялось разрешенным, однако, это не так. Конфликт между механикой и термодинамикой, описывающей необратимое поведение закрытых систем (и реально наблюдаемое!), в принципе неразрешим в рамках классической механики. Автор полагает, что сам конфликт возник из-за ограниченности механики, которая не исследует природу взаимодействия и достаточно формально моделирует реальные взаимодействия весьма специфическими потенциальными силами. Если этого не делать, то противоречие вполне разрешимо, правда, при этом и механика меняется достаточно радикально.

Цель данного доклада состоит в анализе данного конфликта. Термодинамическое необратимое поведение макроскопических систем, сопровождающееся ростом энтропии, обусловлено происходящими в них процессами переноса. Последние же тесно связаны с флуктуационными процессами. Наличие этих процессов радикально меняет характер взаимодействия частиц системы.

Значительное место в докладе уделено механизмам процессов переноса и их анализу в различных системах: разреженных и плотных газах, в жидкостях, в наножидкостях. Значительное место уделяется молекулярно-динамическому моделированию процессов переноса и точности такого моделирования.

Автор признателен Г.Э. Норманну за многочисленные стимулирующие дискуссии по теме данной работы.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант 10-01-00074) и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России" на 2009-2013 гг." (Госконтракт № 14.740.11.0103).

## ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАЗЛИЧНЫХ АКТИВИРОВАННЫХ УГЛЕЙ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ ИХ В ЭЛЕКТРОДАХ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

*Вервикишко Д.Е.\* , Школьников Е.И., Ямилкин И.В., Саметов А.А., Атаманюк И.Н., Григоренко А.В.*

*ИВТ РАН, Москва,*

*\*vitkina-darya@yandex.ru*

Активированные угли широко применяются при создании электродов суперконденсаторов. Изучение нанопористой структуры данных углеродных материалов является неотъемлемой частью работы по повышению удельных характеристик суперконденсаторов.

Были проведены работы по исследованию пористой структуры и электрохимических характеристик активированных углеродных порошкообразных материалов разного генезиса. Работы по исследованию пористой структуры включали в себя подготовку образцов и их измерение в приборе на основе метода Лимитированного Испарения. Работы по исследованию электрохимических характеристик включали в себя предварительную подготовку активной массы: измельчение в шаровой или дисковой мельнице, создание активного слоя с использованием связующего (Naflon, PVDF, Ф-42, Ф4П); проведение непосредственных электрохимических экспериментов: измерение зарядно-разрядных кривых, циклических вольтамперограмм, определение сопротивлений, обсчет полученных кривых для определения удельных мощностей, емкостей и энергий суперконденсаторов с сернокислотным электролитом.

Были изучены образцы активированных углей, полученных из древесины, рисовой шелухи, торфа, шелухи кокосового ореха и некоторые другие. Данные материалы значительно отличаются по структуре друг от друга. По нашему мнению образование двойного электрического слоя (ДЭС) происходит в порах радиуса 0,7-2 нм. Наибольший объем и поверхность микропор в этом диапазоне радиусов имеет уголь из древесины. Вероятно, во многом из-за этого емкость ДЭС и энергия, накопленная суперконденсатором, максимальна при использовании этого активированного угля в электродах. Объем пор в диапазоне радиусов 0,7-2 нм в активированном угле из рисовой шелухи незначительно меньше, чем в угле из древесины. Он составил 1,34 см<sup>3</sup>/г. При этом энергоемкость суперконденсатора значительно ниже: 7,4 Вт\*ч/кг по сравнению с 9,7 Вт\*ч/кг на активированном угле из древесины. Мы предполагаем, не вся поверхность микропор задействована в образования ДЭС. Возможно, на поверхности данного материала располагаются функциональные группы, препятствующие проникновению серной кислоты в поры электрода. Образцы углей из торфа (тип СКТ-6) имеют менее развитую пористую структуру. Объем пор в интересующем нас диапазоне радиусов составляет 0,65 см<sup>3</sup>/г и менее. При этом энергоемкость суперконденсаторов на их основе не превышает 6 Вт\*ч/кг.

Таким образом, установлено, что не только поверхность микропористой структуры электродов суперконденсаторов играет большую роль в процессе образования ДЭС. Но есть и другие факторы, влияющие на его образование. На сегодняшний день важной задачей является выявление влияния различных функциональных групп на поверхности пор.

## МЕТОДИКИ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ТЕЧЕНИЙ В КАНАЛАХ

*Иванов Д.А.\* , Рудяк В.Я.*

*НГАСУ (Сбистрин), Новосибирск,*

*\*divanov@list.ru*

Работа посвящена методикам моделирования течений жидкости и плотного газа в наноканалах методом молекулярной динамики (ММД). История ММД моделирования течений жидкостей в наноканалах насчитывает более двух десятилетий и значительное число публикаций. Тем не менее, до последнего времени так и не удалось создать адекватный инструментарий. Так, для реализации стационарного течения обычно использовались некоторые искусственные приемы. Вводится некоторая массовая сила, на несколько порядков превышающая гравитационную, в реальных течениях отсутствующая. Ее наличие приводит к ускорению молекул жидкости, и необходимости убирать это ускорение с помощью различных искусственных процедур. В результате создается весьма специфическое течение, характеристики которого не меняются вдоль канала. В частности, отсутствует перепад давления, столь характерный для реальных течений. Таким образом, до сих пор нет работ, где течение бы создавалось перепадом давления или заданием расхода жидкости. Цель данной работы и состояла в разработке нового алгоритма ММД моделирования течения в канале, возникающего при заданном расходе флюида на входе. Флюид в канале моделировался молекулами с потенциалом взаимодействия Леннард-Джонса, а стенки – несколькими слоями плотноупакованных молекул, при этом материал стенок варьировался. В первой предложенной методике течение задается с помощью псевдопериодических условий. Молекулы не могут проникнуть сквозь левую границу, они диффузно отражаются от нее. Сквозь правую границу молекулы могут проходить, и при этом они взаимодействуют с молекулами, находящимися у левой грани, как при периодических граничных условиях. Сразу после того, как молекула прошла сквозь правую границу канала, она помещается в начале канала у левой границы, и ей задается новое значение скорости, полученное случайным образом в соответствии с распределением Максвелла при заданной температуре. При этом компонента скорости вдоль оси течения всегда задается направленной вправо. В результате возникает поток молекул движущихся слева направо и тем самым формируется течение. Во второй методике моделировалось течение с заданным расходом. В этой модели на левой границе канала с некоторым интервалом времени в канал заходят молекулы. Тем самым задается некоторый расход. На правой границе канала есть некоторая малая область (контрольный объем), в которой поддерживается заданная плотность жидкости. Также в начале и в конце канала есть области, в которых поддерживается постоянная температура молекул. Задавая величину расхода, температуры жидкости и плотность в контрольном объеме, мы полностью задаем характеристики течения: среднюю плотность, среднюю скорость, давление в начале и в конце канала. Тем самым удается моделировать течение жидкости нужной плотности и скорости. В обеих методиках наблюдается параболический профиль скорости со скольжением на стенках канала. Предложенные модели впервые позволили промоделировать течения с градиентом давления. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №10-01-00074) и Минобрнауки РФ (проект 14.740.11.0579).

## ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА AG/CU(111) МЕТОДОМ КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

*Игошкин А.М.\* , Головнев И.Ф., Фомин В.М.*

*ИТПМ СО РАН, Новосибирск,*

*\*igoshkin@itam.nsc.ru*

Среди всего многообразия технологических задач, решаемых на данный момент, одной из важнейших является задача осаждения металлических нанопленок на металлическую подложку. Существует большое число как теоретических, так и экспериментальных исследований данной проблемы. Однако, в настоящее время изучение совокупности механизмов, ответственных за формирование наблюдаемых структур тонких пленок, далеко не завершено. Для выявления этих механизмов необходимы различные методы исследования динамических процессов на атомарном уровне. К ним относятся метод молекулярной динамики, Монте-Карло, а также прямые квантовые расчеты. В ряде случаев, например, при работе с системами порядка нескольких тысяч частиц, наиболее предпочтительным среди них является метод молекулярной динамики, что обуславливает его актуальность при решении данной задачи. Металлизация поверхности является комплексной фундаментальной проблемой, поэтому необходимо ее разбиение на более обозримые подзадачи. Среди них одной из самых важных является проблема формирования границы раздела осажденный слой – подложка. Особое значение и интерес имеет исследование гетероструктур из материалов, значительно отличающихся по параметру решетки, таких как серебро и медь. На их примере и рассматривается данная подзадача.

В работе исследуется формирование нанослоя на поверхности медной (111) подложки путем моделирования осаждения серебра из газообразной фазы с последующим детальным анализом. Показано, что при осаждении нанослоев на бездефектную подложку в диапазоне температур от 300К до 600К формируется муаровая суперструктура. Исследован также вариант, при котором в верхнюю плоскость подложки вводятся случайным образом поверхностные вакансии при формировании начального состояния системы. Выявлено, что в этом случае при осаждении нанослоев возможно образование периодической структуры из поверхностных дислокационных петель в верхней плоскости подложки.

По причине ряда ограничений метода классической молекулярной динамики, возникающих при моделировании осаждения, данная система также исследовалась с помощью равновесной молекулярной динамики. Для этого производилась релаксация к равновесному состоянию структур, максимально соответствующих экспериментальным данным СТМ. Анализ полученных систем показал хорошее соответствие ММД и эксперимента.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОНИЦАЕМОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СОРБЕНТОВ ПО ОТНОШЕНИЮ К ГЕЛИЮ И ПАРАМ ВОДЫ

*Казанин И.В.\* , Зиновьев В.Н., Верещагин А.С., Лебига В.А., Пак А.Ю., Фомин В.М.,  
Фомина А.Ф.,*

*ИТПМ СО РАН, Новосибирск,*

*\*kazaniniv@gmail.com*

На сегодняшний день гелий, в основном, получается из природного газа с содержанием гелия менее 0,5% посредством применения криогенных технологий. При этом обычно требуется охлаждение всего объема углеводородов, что делает разделение газовой смеси на компоненты весьма энергоемким и дорогостоящим. Поэтому актуальным является создание новых и более эффективных некриогенных способов производства гелия [1-2].

Можно выделить два основных некриогенных метода разделения газовых смесей: мембранный и сорбционный. Целью данной работы было исследование эффекта избирательной проницаемости гелия наноструктурированными микрообъектами, а также исследование адсорбционных характеристик по отношению к парам воды.

В работе приводятся результаты экспериментального исследования динамики процессов поглощения (сорбции) и дегазации (десорбции) гелия различными типами сорбентов с наноструктурированными проницаемыми границами: алюмосиликатными модифицированными цеолитами и композитным гранулированным сорбентом на основе стеклянных микросфер и псевдобемита.

В качестве рабочих газов при исследовании применялись: воздух, метан, гелий и воздушно-гелиевые и метан-гелиевые смеси. Для насыщения газов и смесей парами воды применялся специальный увлажнитель. Исследования проводились на специальном экспериментальном стенде, основой которого являлась емкость из нержавеющей стали объемом  $0,55 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3$ , в которую помещался исследуемый сорбент.

Эксперименты продемонстрировали, что исследованные типы сорбентов являются непроницаемыми для воздуха, метана и проницаемыми для гелия. На основании сравнения экспериментальных зависимостей изменения давления в емкости от времени показано, что скорость протекания процессов сорбции и десорбции гелия, в основном, определяется величиной перепада парциальных давлений гелия во внешнем объеме и внутри частиц, при постоянстве других параметров (температуры, материала и размера частиц и т. д.). При этом установлено, что наличие сопутствующего газа в объемной фазе не оказывает влияния на процессы сорбции и десорбции гелия.

Композитный сорбент продемонстрировал высокую адсорбционную способность по отношению к парам воды. Также следует отметить, что степень насыщения композитного сорбента парами воды практически не оказывает влияния на темпы процессов сорбции и десорбции гелия данным типом сорбента.

Работа выполнена при финансовой поддержке интеграционного проекта СО РАН № 91, гранта Президента РФ для молодых ученых (МК-6657.2012.1) и гранта Президента РФ для ведущих научных школ (НШ-1541.2012.1)

Литература

1. Дытнерский Ю.И., Брыков В.П., Каграманов Г.Г. Мембранное разделение газов. М.:Химия. 1991.
2. Верещагин А.С., Зиновьев В.Н., Пак А.Ю., Казанин И.В., Фомина А.Ф., Лебига В.А., Фомин В.М. Оценка коэффициентов проницаемости стенок микросфер // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2010. Том 5, выпуск 2. Стр. 8-16.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ГАЗА ЧЕРЕЗ ТОНКИЕ ПРОНИЦАЕМЫЕ МЕМБРАНЫ С НАНОКАНАЛАМИ

*Зиновьев В.Н.\* , Казанин И.В., Лебига В.А., Пак А.Ю.*

*ИТПМ СО РАН, Новосибирск,*

*\*zinoviev@itam.nsc.ru*

В настоящее время течения в микро-и наноканалах широко используются в различных областях науки и промышленности. В качестве конкретных примеров устройств можно упомянуть печатающие головки струйных принтеров, различные виды микроканалов в химических реакторах, системы адресной доставки (к определенным тканям и органам) лекарственных средств, наноэлектромеханические системы (НЭМС) и др. Следует также отметить, что в последние годы наблюдается значительный рост интереса к различным технологическим процессам мембранного разделения жидких и газообразных сред, мембранные системы очистки жидкостей, мембраны датчиков и анализаторов для различных высокочувствительных приборов и т.д. Одна из часто используемых мембран - трековая мембрана (ТМ). Трековые мембраны – тонкие полимерные пленки толщиной от 10 до 25 мкм изготовленные из лавсана (полиэтилентерефталата), поликарбоната или других материалов, которые имеют систему сквозных пор с плотностью пор в диапазоне от  $10^4$  до  $3 \cdot 10^9$ ,  $\text{см}^{-2}$  и диаметром от 20 нм до 5 - 7 мкм.

Одно из основных свойств ТМ, их селективная особенность, обусловленная наличием в них наноструктур, используется для разделения газовых смесей и выделения изотопов. В качестве другого примера применения ТМ может быть приведено их использование как проникаемой оболочки плохообтекаемого тела, например кругового цилиндра, для вдува легкого газа в пограничный слой или наоборот отсос газа из потока с целью воздействия как на процесс обтекания тела потоком в непосредственной близости к нему, так и на характеристики течения (средние и пульсационные) вниз по потоку. В частности, полное или частичное подавление процесса генерации вихревой дорожки за цилиндром позволит изменить его аэродинамическое сопротивление в потоке.

Целью данного исследования было изучение различных физических характеристик потока через тонкие пленки с наноканалами. Эксперименты проводились в закрытом стенде, состоящим из круглой трубы из нержавеющей стали с внутренним диаметром 0,027 м и объемом  $1,1 \cdot 10^{-3}$ ,  $\text{м}^3$ , которая с помощью специального устройства разделена на две равные части. Трековая мембрана устанавливается внутри этого устройства. Исследуемый газ напускался до требуемого давления в одну часть трубы. После этого газ транспортировался через ТМ в другую часть трубы в течение некоторого времени, необходимого для установления одинакового давления в обеих частях. Измерение давления в обеих частях трубы осуществляется с помощью датчиков давления FESTO типа SDET-22T с диапазоном измерения до 1,6 МПа и точностью  $\pm 100$  Па. Исследовался массовый расход через наноканалы и проницаемость ТМ для различных газов (азот, гелий и их смеси) и различных типов ТМ. Использовались ТМ из полиэтилентерефталата толщиной от 10 до 25 мкм с различной внутренней структурой пор: с пересечением треков, с параллельными треками и с асимметричными треками. Размеры пор ТМ варьировались от 22 до 50 нм в диаметре, при среднем числе пор  $1-3 \cdot 10^9$ ,  $\text{см}^{-2}$ . В этой работе были получены расходные характеристики потока для ТМ с различной внутренней структурой пор для азота, гелия и их смесей при различных способах подвода газа к ТМ. Сравнение расходных характеристик потока для ТМ с асимметричным типом наноканалов для случаев прямого и обратного течения газа не показало заметного различия в значениях массового расхода через ТМ. Также приводятся результаты измерений характеристик сжимаемого дозвукового потока при поперечном обтекании кругового цилиндра с проникаемой стенкой, покрытой ТМ, при наличии вдува и отсоса через нее газа.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Сибирского отделения РАН (партнерский интеграционный проект № 12) и гранта Президента РФ для ведущих научных школ (НШ-1541.2012.1).

## ОБРАЗОВАНИЕ БЕЗВОДОРОДНОЙ НАНОАЛМАЗНОЙ ПЛЕНКИ ПРИ ЗАКАЛКЕ ЖИДКОГО УГЛЕРОДА

*Лысенко И.Ю.\* , Башарин А.Ю.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*iul87@mail.ru*

Наноалмазы и наноалмазные пленки благодаря уникальным физическим и химическим свойствам находят применение в электронике, биомедицине и других областях. Алмаз является фазой высокого давления углерода и метастабилен при нормальном давлении, а стабильной фазой является графит. Основными методами получения наноалмазных материалов являются детонационный синтез и химическое осаждение из газовой фазы (CVD). Известным, но нетрадиционным для углерода способом получения метастабильной твердой фазы является затвердевание расплава, переохлажденного ниже температуры плавления  $T_{MS}$  метастабильной фазы. Под температурой плавления метастабильной фазы понимается температура, при которой сравниваются потенциалы Гиббса метастабильной фазы и расплава. Оценка температуры плавления метастабильного алмаза  $T_{DM}$  в работе [1] в рамках классической термодинамики дала величину  $T_{DM} = 4160$  К при давлении 12 МПа. Учтявая, что температура плавления графита  $T_G = 4800$  К [2], необходимо переохладить расплав более, чем на  $T_G - T_{DM} = 750$  К. Для достижения такого переохлаждения требуется высокая скорость охлаждения, иначе произойдет кристаллизация расплава в графит.

Для реализации высокой скорости охлаждения расплава был проведен эксперимент по импульсному лазерному плавлению графитовых островков на подложке из природного алмаза, теплопроводность которого может достигать 2300 Вт/(м\*К) [3]. В затвердевшем углероде были обнаружены полупрозрачные пленки. Их наноалмазная структура установлена по результатам исследования пленок методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). На АСМ-изображениях были различимы кристаллиты около 10 нм. Достоверно обнаружить кристаллиты меньшего размера не позволяли применяемые зонды с радиусом закругления 7–10 нм.

Спектр КРС пленки содержал линию  $1327 \text{ см}^{-1}$  шириной на полувысоте  $5,8 \text{ см}^{-1}$ , свидетельствующую о нанокристаллической алмазной структуре. Согласно модели "запертого фонона" (phonon confinement), эта линия является линией алмаза  $1332 \text{ см}^{-1}$ , претерпевающей уширение и сдвиг в сторону низких частот в результате уменьшения размеров кристаллита, которые ограничивают время жизни фонона. В рамках модели связь размера кристаллита  $L$  и ширины  $\Gamma$  указанной линией описывается выражением:  $\Gamma(L) = A + B/L$ , где  $A$  и  $B$  – параметры,

вычисляемые на основе экспериментальных данных. Параметры  $A$  и  $B$ , как правило, получают на основании КРС спектров алмазов детонационного синтеза, которые обладают дефектами, следовательно, эффективная величина  $L$  оказывается меньше размера кристаллита. Кроме того, представленные в литературные зависимости (значения  $A$  и  $B$ ) сильно расходятся. Уточнение зависимости  $\Gamma(L)$  представляет большой интерес в виду того, что спектроскопия КРС является относительно быстрым, неразрушающим и в то же время мощным методом структурного анализа углеродных материалов.

Обсуждаются перспективы развития метода получения нанокристаллических алмазных пленок при кристаллизации переохлажденного расплава углерода и возможность использования таких пленок с целью получения опорных данных для построения достоверной зависимости  $\Gamma(L)$ .

1. Башарин А.Ю., Дождиков В.С., Кириллин А.В., Турчанинов М.А., Фокин Л.Р. // ПЖТФ. 2010. Т. 36. В. 12. С. 39–47.
2. Башарин А.Ю., Брыкин М.В., Марин М.Ю., Пахамов И.С., Ситников С.Ф. // ТВТ. 2004. Т. 42. №1. С. 64–71.
3. Wei L., Kuo P.K., Thomas R.L., Anthony T.R., Banholzer W.F. // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70 P. 3764–3767.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА САМОСБОРКИ ДЛЯ СИСТЕМ ПОЛИМЕР-НАНОТРУБКА ДЛЯ ПОЛИМЕРНЫХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ

*Триандафиллиди В.М.*

*IHED RAS, Moscow*

*vasiliy.triandafilidi@gmail.com*

### **1. Введение**

Органические солнечные батареи представляют собой перспективное направление в физике солнечных батарей. С потенциальным КПД порядка 20 процентов, с удобными механическими характеристиками, они служат прекрасным конкурентом твердотельным устройствам. Настоящая работа посвящена построению молекулярной модели одной из таких солнечных батарей [1]. Расчеты были выполнены в пакете LAMMPS [2].

Опишем схему работы подобной батареи. Она состоит из донора-полимера (полупроводника  $n$ -типа) и акцептора-нанотрубки ( $p$ -тип полупроводника). При поглощении света рождается виртуальная водородоподобная структура - экситон (связанное состояние электрона и дырки). При диссоциации экситона он разделяется на электрон и дырку и участвует тем самым в возникновении фотоЭДС.

### **2. Методы изучения**

Моделирование процесса самосборки включает в себя четыре пункта:

1. Задание координат нанотрубки и полимера
2. Задание потенциала взаимодействия (форсфилда)
3. Задание их топологического взаимоположения
4. Анализ результатов

**1) Создание модели нанотрубки** Были созданы два типа УНТ с разной киральностью. Межатомные взаимодействия были заданы специальным потенциалом AIREBO, описанным в работе [3], [4].

#### **2) Задание модели полимера**

Задание модели полимера включает в себя несколько этапов таких как : задание топологии (пространственных координат и расположение), задание форсфилда [4]. Форсфилд включает в себя набор параметров для задания межатомного взаимодействия. Он делится на non-bonded interaction (Ленардо-Джонсовский потенциал и потенциал Кулона) и bonded interaction, что включает в себя изменение энергии системы при изменении взаимного расположения связанных атомов.

#### **3) Исследование эффекта самосборки**

Для получения  $p$ - $n$  перехода важно иметь соприкосновение полимера и нанотрубки. Оказывается, что полимер сам обвивается вокруг нанотрубки за время, равное времени релаксации (порядка 100 пикосекунд). При этом важно их топологическое взаиморасположение (параллельное, перпендикулярное). Это явление играет важную роль в изучении свойств батарей методом молекулярной динамики [4].

1. Kymakis Kymakis, E.; Amaratunga, G. A. J. Single-Wall Carbon Nanotube/Conjugated Polymer Photovoltaic Devices // Appl. Phys. Lett. 2002, 80, 112- 114
2. LAMMPS LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. <http://lammps.sandia.gov>
3. Airebo Stuart, Tutein, Harrison // J Chem Phys, 112, 6472-6486 (2000).
4. Bernardi Bernardi Marco, Giulianini, Michele, Grossman, Jeffery "Self-assembly and its impact on interfacial charge transfer in carbon nanotube/P3HT solar cells" // ACS Nano., 4(11) pp. 6599-6606.

## ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

*12 ЦНИИ МО РФ* — 12-ый Центральный научно-исследовательский институт Министерства обороны РФ, Сергиев Посад,  
*ИВТ РАН* — Институт высоких температур РАН, Москва,  
*ИГиЛ СО РАН* — Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН, Новосибирск,  
*ИОФ РАН* — Институт общей физики РАН, Москва,  
*ИОХ РАН* — Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва,  
*ИПФ РАН* — Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород,  
*ИПМАШ РАН* — Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург,  
*ИСЭ СО РАН* — Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск,  
*ИТ СО РАН* — Институт теплофизики Сибирского отделения РАН, Новосибирск-90,  
*ИТПМ СО РАН* — Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Институтская, 4/1, Новосибирск 630090, Новосибирская область,  
*ИТЭС ОИВТ РАН* — Институт теплофизики экстремальных состояний Объединенного института высоких температур РАН, Москва,  
*ИФМ РАН* — Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород,  
*КБГУ* — Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик,  
*МГУл* — Московский государственный университет леса, Мытищи-5,  
*МИФИ* — Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет), Москва,  
*МФТИ* — Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный,  
*НГАСУ (Сибстрин)* — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин), Новосибирск,  
*ОИВТ РАН* — Объединенный институт высоких температур РАН, Москва,  
*СПбГУ* — Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург,  
*ФИАН* — Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва,  
*ЦНИИМАШ* — Центральный научно-исследовательский институт машиностроения, Королев,  
*ЮУрГУ* — Южно-уральский государственный университет, Челябинск,  
*INED RAS* — Institute for High Energy Densities of Russian Academy of Sciences, Moscow,

## ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. *Андрющенко Владимир Андреевич*, ИТ СО РАН, Новосибирск-90, , phone: +7(913)7478891, +7(383)3308480, vladimir.andryushchenko@gmail.com
2. *Бобарыкина Татьяна Александровна*, ИТПМ СО РАН, Новосибирск, +7(923)1120448, +7(383)3307268, elka\_x@ngs.ru
3. *Боровиков Дмитрий Сергеевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(926)0788549, +7(926)0788549, d.s.borovikov@gmail.com
4. *Бочкарев Анатолий Александрович*, ИТ СО РАН, Новосибирск-90, +7(383)3321731, +7(383)3308480, anaboch@itp.nsc.ru
5. *Быстрый Роман Григорьевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(926)8919776, +7(926)8919776, broman.meld@gmail.com
6. *Вервикишко Дарья Евгеньевна*, ИВТ РАН, Москва, +7(905)7512659, +7(495)4859411, vitkina-darya@yandex.ru
7. *Вервикишко Павел Сергеевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(905)5564475, +7(495)4859411, miptbusiness@gmail.com
8. *Верещагин Антон Сергеевич*, ИТПМ СО РАН, Новосибирск, +7(913)9896591, +7(383)3307268, vereshchag@itam.nsc.ru
9. *Гавашели Юлия Олеговна*, КБГУ, Нальчик, +7(928)7168367, +7(928)7168367, yu-pakhunova@mail.ru
10. *Груздков Алексей Андреевич*, СПбГУ, Санкт-Петербург, +7(812)4286944, +7(812)4284210, gruzdkov@mail.ru
11. *Губин Сергей Александрович*, МИФИ, Москва, +7(495)7885699, +7(499)3242111, sagubin@mephi.ru
12. *Дьячков Сергей Александрович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(926)2890847, +7(926)2890847, serperga@gmail.com
13. *Жилияев Пётр Александрович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(926)1085688, +7(926)1085688, PeterZhilyaev@gmail.com
14. *Зиновьев Виталий Николаевич*, ИТПМ СО РАН, Новосибирск, +7(383)3303921, +7(383)3307268, zinoviev@itam.nsc.ru
15. *Иванов Денис Александрович*, НГАСУ (Сибстрин), Новосибирск, +7(383)2668014, +7(383)2664083, divanov@list.ru
16. *Игошкин Антон Михайлович*, ИТПМ СО РАН, Новосибирск, +7(923)1729543, +7(383)3307268, spoorok@rambler.ru
17. *Казанин Иван Викторович*, ИТПМ СО РАН, Новосибирск, +7(383)3303921, +7(383)3307268, kazaniniv@gmail.com
18. *Казеев Никита Александрович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(915)1883271, +7(000)0000000, kazeevn@gmail.com
19. *Князев Дмитрий Владимирович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4857988, +7(495)4857988, d.v.knyazev@yandex.ru
20. *Козлов Игорь Петрович*, ЦНИИМАШ, Королев, +7(495)5135490, +7(926)4925880, +7(495)5134393, ikozlov43@yandex.ru
21. *Колотова Лада Николаевна*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4858545, +7(495)4857990, lada.kolotova@gmail.com
22. *Красюк Игорь Корнелиевич*, ИОФ РАН, Москва, +7(916)6228254, +7(499)1352055, krasyyuk99@rambler.ru
23. *Куриленков Юрий Константинович*, ОИВТ РАН, Москва, +7(916)1479826, +7(495)4858066, yukurilenkov@rambler.ru
24. *Ланкин Александр Валерьевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(903)5768208, +7(495)4857990, Alex198508@yandex.ru
25. *Лысенко Иван Юрьевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)3625603, +7(495)3625603, iul87@mail.ru
26. *Норман Генри Эдгарович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4859263, +7(495)4857990, genri.norman@gmail.com
27. *Орехов Никита Дмитриевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(985)1886637, +7(495)4857990, nikita.orekhov@gmail.com
28. *Орешкин Владимир Иванович*, ИСЭ СО РАН, Томск, +7(963)1954717, +7(3822)491677, oreshkin@ovpe.hcei.tsc.ru
29. *Писарев Василий Вячеславович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4858545, +7(495)4857990, pisarevvv@gmail.com
30. *Поляков Дмитрий Николаевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)48541810, +7(495)4857990, cryolab@ihed.ras.ru
31. *Потапенко Андрей Иванович*, 12 ЦНИИ МО РФ, Сергиев Посад, +7(495)9930962, +7(495)4859263, a.potapenko@mail.ru
32. *Ромашевский Сергей Андреевич*, ОИВТ РАН, Москва, +7(495)2294240, +7(495)2294240, sa.romashevskiy@gmail.com
33. *Рудяк Валерий Яковлевич*, ИТ СО РАН, Новосибирск-90, +7(383)2668014, +7(383)2664083, valery.rudyak@mail.ru
34. *Савинцев Алексей Петрович*, КБГУ, Нальчик, +7(8662)423777, +7(8662)422560, pnr@kbsu.ru
35. *Смирнов Александр Ильич*, ИПФ РАН, Нижний Новгород, +7(831)4160656, +7(831)4160616, smirnov@appl.sci-nnov.ru
36. *Смирнов Григорий Сергеевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4858545, +7(495)4857990, grs90@mail.ru
37. *Смирнова Дарья Евгеньевна*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4858545, +7(495)4857990, d.e.smirnov@gmail.com
38. *Стариков Сергей Валерьевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(926)8950020, +7(495)4857990, starikov@ihed.ras.ru
39. *Стегайлов Владимир Владимирович*, ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4858445, +7(495)4857990, stegailov@gmail.com

40. *Стучебрюхов Игорь Александрович*, ИОФ РАН, Москва, +7(495)1358372, +7(499)1352055, st777@kapella.gpi.ru
41. *Тимофеев Алексей Владимирович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4859263, +7(495)4857990, timofeevalvl@gmail.com
42. *Триандафилиди Василий Михайлович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(903)2997855, +7(495)4857990, vasily.triandafilidi@gmail.com
43. *Ульяненко Руслан Вячеславович*, 12 ЦНИИ МО РФ, Сергиев Посад, +7(963)6721970, +7(963)6721970, ulyanenkov@mail.ru
44. *Фаляхов Тимурхан Маратович*, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, +7(926)8113373, +7(926)8113373, tfalyakhov@gmail.com
45. *Фомин Василий Михайлович*, ИТПМ СО РАН, Новосибирск, +7(383)3308534, +7(383)3300655, fomin@itam.nsc.ru
46. *Хищенко Константин Владимирович*, ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4842483, +7(495)4857990, konst@ihed.ras.ru
47. *Чирков Павел Владимирович*, ЮУрГУ, Челябинск, +7(351)2654713, +7(351)2679140, p.chirkow@yandex.ru
48. *Шиплюк Александр Николаевич*, ИТПМ СО РАН, Новосибирск, +7(383)3302464, +7(383)3307268, shiplyuk@itam.nsc.ru
49. *Шумова Валерия Валерьевна*, ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4842610, +7(495)4857990, shumova@ihed.ras.ru