



XV РОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
(с международным участием)
ПО ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ВЕЩЕСТВ
(PKTS–15)
15–17 октября 2018 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Москва, 2018

СОДЕРЖАНИЕ

1. PLENARY REPORTS

A-514. <i>Иосилевский И.Л.</i> Аномальная термодинамика энтропийных фазовых переходов	4
A-716. <i>Станкус С.В., Абдуллаев Р.Н., Агажанов А.Ш., Козловский Ю.М., Савченко И.В., Самошкин Д.А., Хайруллин Р.А., Яцук О.С.</i> Экспериментальное исследование теплофизических свойств и фазовых превращений металлов и сплавов в твердом и жидком состояниях	4
A-707. <i>Петров В.А.</i> Спектральная и температурная зависимость коэффициента поглощения расплава оксида алюминия	5
A-704. <i>Belonoshko A. B.</i> State of iron in the earth core: paradigm change	6
A-697. <i>Григорьев Б.А., Герасимов А.А., Александров И.С.</i> Прогнозирование термодинамических свойств и фазовых равновесий углеводородов нефти и нефтепродуктов на базе многоконстантных фундаментальных уравнений состояния	6
A-628. <i>Байдаков В.Г., Каверин А.М., Андбаева В.Н., Хотяенкова М.Н.</i> Поверхностное натяжение растворов ожиженных газов: эксперимент, теория, моделирование	7
A-619. <i>Шейндлин М.А.</i> Современное состояние применения лазерного нагрева в высокотемпературной теплофизике	8
A-611. <i>Белов Г.В., Дьячков С.А., Левашов П.Р., Мезинов Н.С., Минаков Д.В., Морозов И.В., Смирнов В.Н.</i> База данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ «ИВТАНТЕРМО-Онлайн»	8
A-566. <i>Левашов П.Р., Минаков Д.В.</i> Оценка критической точки тугоплавких металлов на основе первопринципных расчетов	9
A-537. <i>Дмитриев А.С.</i> Теплофизические свойства термоинтерфейсных наноматериалов для термостабилизации энергетических и электронных устройств	10
A-848. <i>Славин А.В.</i> Расчётно-экспериментальные исследования теплофизических свойств материалов для авиационной техники	10

2. EQUATIONS OF STATE, PHASE TRANSITIONS AND CRITICAL PHENOMENA

I-646. <i>Хомкин А.Л., Шумихин А.С.</i> Уравнение состояния и металлизация в парах металлов и инертных газах	11
I-782. <i>Норман Г.Э., Саитов И.М.</i> Плазменный фазовый переход в водороде при высоких давлениях	11
I-649. <i>Безверхий П.П., Мартынец В.Г., Каплун А.Б., Мешалкин А.Б.</i> Расширенное описание термических свойств диоксида углерода с помощью уравнения состояния с малым числом параметров	12
I-713. <i>Маевский К.К.</i> Численное моделирование термодинамических параметров смесей с малопараметрическим уравнением состояния компонентов	13
I-594. <i>Магомедов Р. А., Ахмедов Э. Н., Мейланов Р. Р., Бейбалаев В. Д., Аливердиев А. А.</i> Расчет теплофизических свойств криптона и ксенона на основе фрактального уравнения состояния	14
O-654. <i>Кузнецов К.И., Сухих А.А., Гранченко П.П., Скородумов С.В.</i> Расчет термодинамических функций по результатам совместных термических и акустических измерений	14

О-669. <u>Билалов Т.Р., Гумеров Ф.М.</u> Определение давления насыщенных паров ароматических углеводородов по экспериментальным данным их растворимости в сверхкритическом CO ₂	15
О-673. <u>Рыков В.А., Рыков С.В., Свердлов А.В.</u> Фундаментальное уравнение состояния R1234yf	16
О-693. <u>Петрик Г.Г.</u> О круглых датах, острых вопросах и решении проблем малопараметрических уравнений состояния методом логической абдукции	16
О-699. <u>Куликов В.Д., Беляков М.Ю.</u> Уравнения изоплер бинарной смеси в окрестности критической точки жидкость-пар в рамках теории скейлинга	17
О-702. <u>Рыков В.А., Кудрявцева И.В., Рыков С.В.</u> Фундаментальное уравнение состояния аргона, удовлетворяющее масштабной гипотезе и работающее в области высоких температур и давлений	18
О-719. <u>Мартынова И.А., Иосилевский И.Л.</u> Влияние нелинейного экранирования на области термодинамической устойчивости комплексной плазмы	18
О-741. <u>Норман Г.Э., Писарев В.В., Флейта Д.Ю.</u> Особенность двухчастичного коррелятора в окрестности точки фазового перехода расплава чистого металла	19
О-515. <u>Емельянов А.Н.</u> Оценка параметров критической точки вольфрама и меди из экспериментов по изэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых металлов	20
О-815. <u>Очков В.Ф., Устюжанин Е.Е., Знаменский В.Е., Рыков С.В., Рыков В.А.</u> Исследование плотности жидкости, плотности газа и давления: некоторые современные модели и численные данные на линии насыщения H ₂ O	20
О-519. <u>Капильный А.Г., Кондратьев А.М., Плетнев А.Е., Рахель А.Д.</u> Измерение скорости звука для жидкого железа в окрестности перехода металл-неметалл	21
О-547. <u>Терновой В.Я., Николаев Д.Н., Острик А.В.</u> Определение параметров критической точки фазового перехода жидкость-пар для бора.	21
О-555. <u>Милютин В.А.</u> Экспериментальное исследование плотности газовой системы гелий-азот-неон при низких температурах	22
О-565. <u>Османова Б.К., Базаев Э.А., Базаев А.Р.</u> Экспериментальное исследование термодинамических свойств систем вода-алифатический спирт в широком диапазоне параметров состояния	23
О-571. <u>Чигвинцев А.Ю., Иосилевский И.Л., Ногонова Л.Ю.</u> Аномалии профиля пространственного распределения ионов в ловушках в приближении локального уравнения состояния	23
О-617. <u>Абдулагатов И.М., Базаев А.Р., Базаев Э.А., Османова Б.К.</u> Фазовые превращения и объемные свойства тройной системы вода-1-пропанол-н-гексан вблизи критической точки	24
Р-691. <u>Яруллин Л.Ю., Зарипов З.И., Гумеров Ф.М.</u> Тепловые эффекты при обработке основных компонентов природных биосистем в среде сверхкритического диоксида углерода	25
Р-805. <u>Воронов В.П., Поднек В.Э.</u> Адиабатическая калориметрия переохлажденно-го состояния жидкой воды	26
Р-803. <u>Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.</u> Анализ отклонений димеризационного равновесия от идеальности в смесях с взаимодействием в форме прямоугольной ямы	26
Р-624. <u>Исмагамбетова Т.Н., Габдуллин М.Т., Рамазанов Т.С.</u> Уравнение состояния плотной неизотермической плазмы	27
Р-526. <u>Ахметзянов Т.Р., Хайрутдинов В.Ф., Габитов И.Р., Гумеров Ф.М.</u> Исследование фазового равновесия бинарной системы «нафталин – СКФ растворитель»	27

P-736. <i>Хазипов М.Р., Галимова А.Т., Гатин Р.С., Сагдеев А.А.</i> Растворимость антрацена в сверхкритическом диоксиде углерода	28
P-732. <i>Кудрявцева И.В., Рыков С.В., Рыков В.А.</i> Анализ методов построения линии фазового равновесия для разных моделей среднего диаметра	29
P-731. <i>Пешикина К.Г., Ткачев Н.К.</i> Статистико-термодинамический анализ комплексобразования в солевых расплавах	30
P-576. <i>Молодец А.М.</i> Теплофизические свойства расплава карбида бора (B_4C) в мегабарной области давлений ударного сжатия	30
P-561. <i>Рыков С.В., Кудрявцева И.В., Рыков В.А.</i> Метод построения единого фундаментального уравнения состояния SF_6	31
P-573. <i>Вассерман А.А., Галкин В.Н.</i> Уравнения для расчета равновесия жидкость-пар в бинарных смесях, содержащих метан	32
P-690. <i>Безгомонова Е.И., Саидов С.М.</i> Изохорная теплоемкость и линии фазового равновесия бинарной системы n-гексан+вода в интервале концентраций 0-0.2566 м.д. H_2O	32
P-633. <i>Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.</i> Термодинамические характеристики солевых расплавов при учете поляризационных эффектов	33

3. TRANSPORT, OPTICAL AND RADIATION PROPERTIES OF SUBSTANCES

O-539. <i>Олянина Н.В., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И.</i> Вязкость жидких сплавов кобальта с кремнием и бором	34
O-644. <i>Габитов И.Р., Зарипов З.И.</i> Вязкость уксусной и масляной кислот, а также их водных растворов	34
O-676. <i>Кондратюк Н.Д., Писарев В.В.</i> Расчет сдвиговой вязкости жидких углеводородов с помощью методов молекулярной динамики	35
O-610. <i>Поволоцкий И.И., Волосников Д.В., Скрипов П.В.</i> Тепловое сопротивление перегретых водных растворов	36
O-608. <i>Сенченко В.Н., Беликов Р.С.</i> Исследование спектров излучения высоко ориентированного пиролитического графита	36
O-679. <i>Борщев Н.О., Антонов В.А., Белявский А.Е.</i> Решение обратной коэффициентной задачи по поиску отражательно-излучательных характеристик методом регуляризации Тихонова	37
O-685. <i>Мурлиева Ж.Х., Палчаев Д.К., Исхаков М.Э., Рабаданов М.Х.</i> Корреляция электросопротивления и теплового расширения интерметаллида Ti_3Al	38
O-593. <i>Николаев Д. Н., Терновой В. Я., Шутков А.В., Остриж А. В.</i> Удельная электрическая проводимость сапфира при ударном сжатии до 750 ГПа	38
O-592. <i>Палчаев Д.К.</i> Природа формирования температурной зависимости электросопротивления в проводниках	39
O-695. <i>Богатырев А.Ф., Кучеренко М.А., Макеенкова О.А.</i> Транспортные свойства разреженных газов и газовых смесей. диффузия	40
O-572. <i>Галкин Д.А., Поволоцкий И.И., Скрипов П.В.</i> Исследование теплопроводности масел	41
O-540. <i>Скрипов П.В.</i> Тепловая проводимость растворов: перегретые и неустойчивые состояния	41
O-666. <i>Прима А.И., Ding L., Zhang Q., Zhang Z.C.</i> Влияние быстрых радиационных процессов на охлаждение металлической мишени после облучения мощным ионным пучком	42
P-795. <i>Лепешкин А.Р.</i> Методика исследования теплопроводности металлических материалов при воздействии ультразвуковых колебаний	42

P-804. <i>Борщев Н.О., Антонов В.А., Белявский Е.А.</i> Решение обратной коэффициентной задачи по поиску тензора теплопроводности градиентным методом сопряженных направлений	43
P-668. <i>Лаптев Ю.А., Цветков О.Б., Пятаков Г.Л., Зайнуллина Э.Р.</i> Теплопроводность зеотропов диоксида углерода с гидрофторолефинами R1234yf и R1234ze(Z) в состоянии разреженного газа	43
P-665. <i>Сафаров М.М., Яхьяев Ш.О., Сафаров Ш.Р., Хасанова С.С., Розиков К.С., Тиллоева Т.Р., Махмадалии К., Хусайнов З.К.</i> Теплоемкость водного раствора диоксида титана	44
P-647. <i>Молодец А.М., Савиных А.С., Голышев А.А.</i> Прочностные свойства аморфного углерода (стеклоуглерода) в области его аномальной сжимаемости при динамических нагрузках	45
P-639. <i>Кочуров Д.С., Елецкий И.А., Котова Е.С.</i> Расчет транспортных свойств смесей газов на основе гелия для эксперимента по определению коэффициента восстановления температуры	45
P-602. <i>Сафаров М.М., Адужаллилова Ф., Холиков М.М., Рафиев С.С.</i> Теплопроводность водных растворов метилового спирта	46
P-599. <i>Расчектаева Е.П., Станжус С.В., Верба О.И.</i> Исследование теплопроводности смеси R-125/R-134a (39/61) в паровой фазе	47
P-580. <i>Митропов В.В., Цветков О.Б., О.Б., Лаптев Ю.А., Бабич А.Ю.</i> Рабочие вещества с низким потенциалом глобального потепления в технике низких температур	48
P-575. <i>Бельтюков А.Л., Меньшикова С.Г., Ладьянов В.И., Корепанов А.Ю.</i> Влияние малых добавок Ni, Co, Fe на вязкость жидкого алюминия	48
P-543. <i>Цветков О.Б., Лаптев Ю.А., Просторова А.О., Винцаревич А.В.</i> Фактор максвелла для паров 2,3,3,3-тетрафторпропена и цис-1,3,3,3-тетрафторпропена	49
P-847. <i>Шапиева А.Е., Кунаков С.К., Сон Э.Е.</i> Осколки деления и энергетические спектры первичных электронов в делящейся плазме	49

4. THERMODYNAMIC PROPERTIES OF SUBSTANCES IN THE CONDENSED STATE

I-727. <i>Guluzade A., Safarov J., Hassel E., Abdulagatov I.</i> Thermophysical properties of 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	51
O-672. <i>Вервейко В.Н., Вервейко М.В.</i> Структурные характеристики кластеров ароматических углеводородов в широкой области параметров состояния	52
O-703. <i>Борисенко Д.И., Кузнецов К.И., Сухих А.А., Шили А.И.</i> Экспериментальное исследование коэффициента термического расширения теплопроводных прокладок	52
O-710. <i>Файзуллин М.З., Виноградов А.В., Томин А.С., Коверда В.П.</i> Горячие центры кристаллизации в газонасыщенных слоях аморфного льда	53
O-720. <i>Егоров Г.И., Макаров Д.М.</i> Термодинамические свойства водных растворов мочевины и некоторых ее алкил производных в широком интервале параметров состояния	54
O-621. <i>Радченко А.К., Шахов А.В., Неручев Ю.А.</i> Кластеры в «простых» и «нормальных» жидкостях	54
O-794. <i>Соболь О.В.</i> Термодинамические свойства водных растворов тиосульфата натрия	55
O-597. <i>Кулямина Е.Ю., Зицерман В.Ю., Фокин Л.Р.</i> Линия плавления титана: согласование термодинамических данных	56

О-595. <i>Лесев В.Н., Алчагиров Б.Б., Дадашев Р.Х., Кясова О.Х., Узденова А.Н.</i> О возможности существования двойного максимума на изотерме адсорбции бинарных металлических систем	56
О-586. <i>Пахомов Е.П.</i> Дефектная структура кристаллической решетки карбида циркония	57
О-584. <i>Синева М.А., Аристова Н.М., Белов Г.В., Морозов И.В.</i> Программа для совместной обработки экспериментальных данных по инкрементам энтальпии и прямым измерениям теплоёмкости	58
О-581. <i>Пащенко Л.Л., Мирошниченко Е.А.</i> Термодинамическое исследование азидонитро соединений. энергии перестройки радикалов	58
О-564. <i>Таова Т.М., Хоконов Х.Б., Шебзухова И.Г., Алчагиров Б.Б.</i> Методы и приборы для измерения поверхностных энергии и натяжения металлов и сплавов	59
О-527. <i>Неручев Ю.А., Коротковский В.И., Рышкова О.С.</i> Энергия межмолекулярных сил в жидких галогеналканах и их бинарных смесях	60
О-548. <i>Грибченкова Н.А., Смирнов А.С., Алиханян А.С.</i> Энтальпии образования соединений в системах прозрачных проводящих оксидов на основе ZnO по данным кнудсеновской эффузионной масс-спектрометрии	61
Р-694. <i>Калажожков Х.Х., Калажожков Х.Х., Шериева Э.Х.</i> К аналитическому описанию экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных металлических систем, компоненты которых образуют устойчивые химические соединения	61
Р-706. <i>Костановский А.В., Костановская М.Е.</i> Экспериментальная зависимость производства энтропии от скорости изменения температуры	62
Р-839. <i>Сиднов К.П., Воротыло С.А.</i> Ab-initio моделирование и экспериментальное исследование свойств сверхвысокотемпературных твердых растворов $Ta_xZr_{1-x}C$	62
Р-725. <i>Сафаров М.М., Хубатхузин А.А., Файзиев Б.Г., Саидзода К.Б.</i> Теплопроводность композиционных материалов на основе полимеров	63
Р-838. <i>Сыздыкова А.Б., Белов М.П., Абрикосов И.А.</i> Термодинамические свойства серого и белого олова	64
Р-774. <i>Собиров Д.Ф., Сафаров М.М.</i> Поведение и термодинамические характеристики полупроводника GeTe в сегнето- и парафазном состоянии	64
Р-522. <i>Калажожков З.Х., Дзугурова Л.Х., Жанимова Д.А., Карамурзов Б.С., Калажожков Х.Х.</i> Исследование сплавов бинарных систем Sn-Pb и In-Pb методом рфэс	65
Р-661. <i>Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Мороз А.И., Швец П., Яничкович Д.</i> Стеклообразующая способность и особенности кристаллизации аморфных сплавов Al-Ni-Co-Nd(Sm)	66
Р-530. <i>Татаринов А.С., Кобелев М.А., Степанов В.П.</i> Изотермическая сжимаемость бинарных расплавленных смесей галогенидов калия: молекулярно-динамическое моделирование	66
Р-598. <i>Сулимов А.В., Косова Д.А., Дружинина А.И., Тифлова Л.А.</i> Термодинамические свойства метансульфонатов натрия и калия	67
Р-620. <i>Рахманова П.А., Василёв В.А., Соловьёв С.Н., Новиков А.Н., Доронин Я.И., Скорба В.Р.</i> Теплоемкость ионов кадмия и бария в диметилсульфоксиде при 298,15 К	68
Р-622. <i>Аетов А. У., Зарипов З. И., Усманов Р. А., Накипов Р. Р.</i> Термодинамические характеристики водной эмульсии олеиновой кислоты	68
Р-631. <i>Андрусова Н.Н., Жаворонок Е.С., Легонькова О.А., Кедик С.А.</i> Улучшенные составы для эндопротезирования	69

P-642.	<i>Мацкевич Н.И., Вольф Т.А., Самошкин Д.А., Станкус С.В., Вязовкин И.В.</i> Теплоемкость (Er, In)-замещенного церата бария в интервале температур 200-700 К	70
P-657.	<i>Косова Д.А., Сулимов А., Тифлова Л.А., Монаенкова А.С.</i> Термодинамические свойства метансульфонатов меди и цинка	70
P-660.	<i>Закирьянов Д.О., Кобелев М.А., Ткачѐв Н.К.</i> Характеристики плавления галогенидов натрия: молекулярно-динамическое моделирование	71
P-843.	<i>Мухамедов Б.О., Саенко И.С., Фабричная О.Б., Абрикосов И.А.</i> Theoretical and experimental study on thermodynamic properties intermetallic compounds in the Zr-Fe binary system	72
Q-636.	<i>Овчинников В.В., Кулаков А.А., Мальцева С.А.</i> Анализ термохимических данных жирных органических кислот	72

5. THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF SUBSTANCES AT HIGH TEMPERATURES

I-705.	<i>Дунаев А.М., Моталов В.Б., Кудин Л.С.</i> Комплексное изучение испарения ионной жидкости BMImBF_4	74
I-677.	<i>Савватимский А.И., Онуфриев С.В.</i> Физические свойства наиболее тугоплавких веществ (графит и карбиды) в диапазоне температур 2000 – 7000 К	74
I-711.	<i>Вервикишко П.С., Шейндлин М.А.</i> Последние достижения в изучении процессов плавления и кристаллизации графита методом лазерного нагрева при давлении до 6 кбар	75
I-722.	<i>Брыкин М.В.</i> Расчет температурного поля в трехмерном углерод-углеродном композиционном материале	76
I-578.	<i>Фаляхов Т.М., Брыкин М.В., Петухов С.В., Шейндлин М.А.</i> Фазовая диаграмма карбида циркония. экспериментальное исследование и математическое моделирование.	76
O-674.	<i>Мальцев М.А., Морозов И.В., Осина Е.Л.</i> Термодинамические свойства двухатомных соединений аргона	77
O-723.	<i>Багашева Т.В., Вервикишко П.С., Шейндлин М.А., Вальяно Г.Е.</i> Кристаллизация и конденсация углерода при давлениях свыше 200 бар	78
O-627.	<i>Черноскутов М. Ю., Ивлиев А. Д., Мешков В. В.</i> Высокотемпературные теплофизические свойства твердых растворов системы Y-Но	78
O-618.	<i>Кондратьев А.М., Рахель А.Д.</i> Методика определения активной компоненты напряжения на образце в экспериментах по импульсному джоулеву нагреву	79
O-726.	<i>Фролов А.М., Шейндлин М.А.</i> Масс-спектрометрический анализ лазерно-индуцированного испарения пирографита вплоть до 4400 К	80
O-583.	<i>Конюхов С.А., Онуфриев С.В., Савватимский А.И.</i> Плавление анизотропного графита при ограничении объема	80
O-560.	<i>Петухов С. В., Фролов А.М., Шейндлин М.А., Фаляхов Т.М.</i> Высокотемпературное (до 4000 К) исследование состава пара при испарении ZrC_x и TaC_x в окрестности зоны гомогенности	81
O-536.	<i>Середкин Н.Н., Онуфриев С.В., Савватимский А.И., Мубояджян С.А., Евдокимов С.А.</i> Свойства карбидов в твердом и жидком состоянии (от 2000 до 6000 К)	82
O-529.	<i>Васин А.А., Фролов А.М., Шейндлин М.А.</i> Наблюдение плавления графита при лазерном нагреве в вакууме	82
O-528.	<i>Нагмутдинова А.И., Зайцев Н.Г., Мазилин И.В.</i> Влияние редкоземельных металлов на теплофизические свойства термостойких покрытий	83

О-521. <i>Кудин Л.С., Моталов В.Б., Дунаев А.М.</i> Термодинамика сублимации триоксидов лантаноидов	83
О-781. <i>Минаков Д.В., Левашов П.Р.</i> Расчет теплоты плавления тугоплавких сплавов металлов с помощью первопринципного моделирования и правило труктона	84
Р-724. <i>Быков В.А., Ягодин Д.А., Куликова Т.В., Шуняев К.Ю.</i> Теплофизические свойства аморфизирующихся сплавов Cu-Zr-Ti	85
Р-775. <i>Рабаданова А.Э., Гаджимагомедов С.Х., Палчаев Д.К., Рагимханов Г.Б., Исакаев М.-Э.Х., Гаджиев М.Х., Демиров Н.А.</i> Структура и свойства уьсо до и после кратковременного воздействия потока плазмы	86
Р-655. <i>Абдулагатова З.З., Абдулагатов И.М., Каллаев С.Н., Омаров З.М., Бакмаев А.Г.</i> Влияние температуры на температуропроводность и теплоемкость песчаника	86
Р-645. <i>Джаппаров Т.А-Г., Базаев А.Р.</i> Экспериментальное определение деструкции термически нестабильных жидкостей	87
Р-638. <i>Качалов В.В.</i> Плотность и поверхностное натяжение сплава уран-хром в жидкой фазе	88
Р-614. <i>Рошупкин В.В., Ляховицкий М.М., Покрасин М.А., Минина Н.А., Кудрявцев Е.М.</i> Влияние закалки на скорость ультразвука в сталях	89
Р-613. <i>Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Михайлов В.А., Попель П.С.</i> Плотность и магнитная восприимчивость сплава CoFeSiBNb	89
Р-568. <i>Попов Д.А., Лебедев А.В., Рязанцева А.А., Малкин А.И.</i> Влияние механоактивации на теплофизические свойства порошкообразных металлов	90
Р-520. <i>Ахтямов Э.Р., Полев В.Ф., Коршунов И.Г., Куриченко А.А., Горбатов В.И.</i> Температуропроводность системы ni-v с содержанием ванадия до 22 ат.% при высоких температурах	91

6. EXTREME STATES OF MATTER

I-730. <i>Rososhek A., Efimov S., Tewari S., Yanuka D., Krasik Ya.E.</i> On phase transitions in different metals	92
О-640. <i>Струлева Е.В., Комаров П.С.</i> Абляция титана под действием фемтосекундных лазерных импульсов	92
О-616. <i>Богданов Е.Н., Жерноклетов М.В., Козлов Г.А., Медведев А.Б., Родионов А.В.</i> Микроволновая доплеровская диагностика ударно-сжатой плазмы аргона	93
О-563. <i>Апфельбаум Е.М.</i> Теплофизические свойства низкотемпературной плазмы металлов	93
О-550. <i>Коробенко В.Н., Рахель А.Д.</i> Теплофизические свойства плотной плазмы свинца	94
О-535. <i>Грязнов В.К., Иосилевский И.Л.</i> Теплофизические свойства плотных молекулярных газов в квазихимическом представлении	95
О-532. <i>Голышев А.А., Соболев Д.В., Молодец А.М.</i> Электропроводность политетрафторэтилена в мегабарной области квазиизэнтропического сжатия	95
Р-643. <i>Шаленов Е.О., Джумагулова К.Н., Рамазанов Т.С., Рёнке Г., Рейнхольц Х.</i> Динамическая проводимость неидеальной плазмы на основе эффективного потенциала	96
Р-689. <i>Кавыршин Д.И., Кутузов Д.С., Чиннов В.Ф.</i> Экспериментальное наблюдение явления снижения вероятности реализации высоковозбужденных состояний атомов в электродуговой плазме гелия атмосферного давления	97
Р-518. <i>Коданова С.К., Рамазанов Т.С., Исанова М.К.</i> Транспортные свойства горячей плотной плазмы	97

7. DATABASES ON THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF SUBSTANCES

- О-634. Очков В.Ф., Устюжанин Е.Е., Знаменский В.Е., Рыков С.В., Рыков В.А. Разработка интернет-ресурсов для оценки эффективности некоторых ГТУ 99
- О-648. Дударев В.А., Киселева Н.Н. О важности многоуровневого описания химических объектов в онтологиях для интеграции информационных систем в неорганическом материаловедении 100
- О-651. Косинов А.В., Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А. Методы интеграции теплофизических данных на основе онтологий 100
- О-700. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В. Информационные системы для неорганического материаловедения 101
- Р-551. Горохов Л.Н., Осина Е.Л., Ковтун Д.М. Термодинамика испарения трифторида иттрия в форме молекул YF_3 и Y_2F_6 102
- Р-737. Горохов Л.Н., Осина Е.Л., Осин С.Б. Термодинамические функции и энергетическая стабильность трихлорида иттрия и его димера 102

8. NANOMATERIALS, NANOFLUIDS, INTERPHASE PHENOMENA

- И-579. Фокин Л.Р., Алчагиров Б.Б., Коков З.А., Коротков П.К., Элимханов Д.З. Поверхностное натяжение высокочистой ртути в вакууме и атмосфере кислорода. эксперимент 103
- И-696. Абдулагатов И.М., Полихрониди Н.Г., Батырова Р.Г. Влияние неустойчивости на критическое поведение теплоемкости наножидкости этанол+алмаз 104
- И-630. Алчагиров Б.Б., Кясова О.Х., Узденова А.Н. Поверхностное натяжение литиевых сплавов: состояние исследований (обзор) 104
- И-681. Рудяк В.Я. Теплофизические свойства наножидкостей. надежды и реальность 105
- О-849. Закатилова Е.И., Ефремов В.П. Графитизация наноалмаза при нагревании и облучении 106
- О-729. Магомедов М.Н. Изменение фазовой диаграммы простого вещества при уменьшении размера наносистемы 106
- О-688. Калажожиков З.Х., Калажожиков Х.Х., Шериева Э.Х. Уравнение изотермы поверхностного натяжения бинарных металлических систем 107
- О-678. Ахмедов Э.Н. Размерная зависимость температур плавления и кристаллизации молибдена 108
- О-675. Хвезюк В.И. Обобщённая модель сопротивления капилляра 109
- Р-670. Усенов Е.А., Пазыл А.С., Данияров Т.Т., Досболаев М.К., Габдуллин М.Т., Рамазанов Т.С. Получение тонких пленок меди с помощью комбинированного разряда при атмосферном давлении. 109
- Р-837. Шулятев Д.А., Мухамедов Б., Пономарева А.В., Абрикосов И.А., Божко С.И., Ионов А.М., Мазилкин А. А., Смирнова А. И., Волс Б., Швец И. В. Наноразмерные неоднородности в NiO 110
- Р-582. Прокофьев С.И. Эмпирические оценки поверхностного натяжения границ зерен в чистых веществах 110
- Р-596. Баринов А.А., Лю Б. Теплоемкость и теплопроводность нанопленок и нанонитей кремния и германия 111
- Р-652. Скрябин А.С., Веснин В.Р., Цыганков П.А., Чирков А.Ю. Исследование спектральной поглощательной способности наноструктурированных материалов на основе тонких плёнок оксидов металлов в среднем ик диапазоне 112

P-687. <i>Хасанова Р.Р., Жаворонок Е.С., Шабатин А.В., Сенчихин И.Н.</i> Исследование новых эпоксидных композиций с наночастицами серебра методами дифференциальной сканирующей калориметрии и рефрактометрии ¹	113
P-684. <i>Пряжников М.И., Минаков А.В., Рудяк В.Я.</i> Экспериментальное исследование коэффициента вязкости наножидкостей	113
P-683. <i>Вервикишко Д.Е., Кочанова С.А., Долженко А.В., Школьников Е.И.</i> Нанопористые углеродные материалы для суперконденсаторов	114
P-662. <i>Косакович Е.О., Жаворонок Е.С., Сафонов А.В., Сенчихин И.Н.</i> Биоцидная активность гидрофобизованных олигогексаметиленгуанидинов в эпоксидных системах	115
P-554. <i>Оразбаев С.А., Жумадилов Р.Е., Жунисбеков А.Т., Рамазанов Т.С., Габдуллин М.Т., Досболаев М.К., Батрышев Д.Г.</i> Влияние температуры газа на зарождение и рост пылевых наночастиц в ВЧ плазме	116

9. THERMOPHYSICAL MEASUREMENT TECHNIQUES

O-801. <i>Курьяков В.Н., Иванова Д.Д.</i> Исследование фазовых переходов наноэмульсий n-алканов методами динамического и статического рассеяния света	117
O-692. <i>Куриченко А. А., Горбатов В. И., Ивлиев А. Д.</i> Цифровые системы сбора и обработки информации и управления в высокотемпературной теплофизической установке	117
O-615. <i>Сухих А.А., Кузнецов К.И., Скородумов С.В.</i> Экспериментальное исследование теплопроводности теплопроводных прокладок для электронного оборудования	118
O-712. <i>Ермишкин В.А., Минина Н.А., Кудрявцев Е.М., Покрасин М.А.</i> Определение коэффициента температуропроводности углеродной пленки по данным фотометрического анализа спектров яркости отражения от его поверхности.	119
O-600. <i>Дивин А.Г., Пономарев С.В., Любимова Д.А.</i> Методы и средства измерения теплофизических характеристик растительных тканей овощей и фруктов	119
O-588. <i>Ермишкин В.А., Михайлов Д.Л., Минина Н.А., Белоусов О.К., Палий Н.А.</i> Исследование диффузии легирующих элементов в многокомпонентных сплавах Cr-Ni системы методом фотометрического анализа спектров яркости излучения	120
O-714. <i>Черноскутов М.Ю., Ивлиев А.Д., Мешков В.В.</i> Алгоритмы обработки сигналов при измерении теплофизических характеристик методом температурных волн	121
O-559. <i>Артамонов А.В., Мазиллин И.В., Зайцев Н.Г.</i> Высокотемпературный стенд для контроля термостойкости керамических покрытий	121
O-525. <i>Осадчий С.М., Потапов Б.Г., Соколов Н.А.</i> Измерения тепловых потоков в диапазоне от 5 до 2500 киловатт на квадратный метр	122
O-667. <i>Сенченко В.Н., Коновалов П.А., Ильичев М.В., Капустин Д.И.</i> Инфракрасная система для измерения теплового сопротивления микрообъектов.	123
P-718. <i>Григоренко А.В., Беляев Г.Е., Власкин М.С., Липатова И.А., Жук А.З.</i> Повышение химической чистоты электрокорунда путем высокотемпературного прокаливания в вакууме	123
P-791. <i>Пророкова М.В., Бухмиров В.В., Гасъков А.К., Сулейманов М.Г.</i> Теплофизические свойства тонкоплёночных покрытий на основе полых микросфер	124
P-658. <i>Комаров П.С., Струлева Е.В.</i> Интерференционная диагностика динамики движения поверхности мишени при абляции с использованием частотно-модулированного лазерного импульса	125

P-650. <i>Свириденко В.И.</i> Исследование теплофизических характеристик оргстекла на установке тау-5	125
P-623. <i>Сафаров М.М., Неъматов А., Давлатов Р.Дж., Хакимов Д.Ш., Раджабов А.Р., Рафиев С.С.</i> Определение коэффициента поверхностного натяжения растворов методом Ребиндера	126
P-607. <i>Костановский А.В., Пронкин А.А., Зеодинов М.Г., Костановская М.Е.</i> Особенности омического нагрева силицированного карбида кремния при измерении теплофизических свойств в области высоких температур	127
P-585. <i>Русин С.П.</i> Об определении истинной температуры тугоплавких металлов по излучению в «сером» приближении	127
P-567. <i>Благоднравов Л.А., Моденов А.А.</i> Прецизионные измерения термодинамических параметров легкокипящих металлических жидкостей	128
P-562. <i>Менделеев В.Я., Качалов В.В.</i> Влияние теплового фона на измеряемую интегральную направленную мощность излучения образца из сплава Pt-10%Rh	128
P-512. <i>Дороватовский А.В., Шейндлин М.А.</i> Применение пирометра с логарифмическим усилителем в установке импульсного нагрева электрическим током	129

10. COMPUTER SIMULATIONS IN THERMOPHYSICS

I-777. <i>Калиничев А.Г.</i> Новые возможности силового поля ClayFF для атомистического компьютерного моделирования природных и синтезированных нанопористых материалов и их гидратированных поверхностей	130
I-728. <i>Писарев В.В.</i> Вязкость жидких углеводородных смесей: молекулярно-динамическое моделирование и правила смешения	131
I-591. <i>Хвезюк В.И., Баринов А.А., Цяо В.</i> Влияние особенностей взаимодействий фононов на перенос тепла	131
I-603. <i>Апфельбаум М.С., Гаджиев М.Х., Долуденко А.Н.</i> Численное и экспериментальное исследование движения слабопроводящей жидкости, создаваемого сильным неоднородным электрическим полем	132
O-733. <i>Очков В.Ф., Орлов К.А., Герк С.И.</i> Гибридные расчеты теплофизических свойств веществ	132
O-721. <i>Шульц О.В.</i> Модель для оценки термодинамических свойств соединений	133
O-810. <i>Мешков Е.А., Новоселов И.И., Янлыклин А.В.</i> Исследование эволюции атомной структуры ВЭС с помощью моделей на решетке	133
O-682. <i>Захаров С.А., Писарев В.В., Чуданов В.В.</i> Континуальная модель фильтрации флюида в пористой среде	134
O-664. <i>Скурихин А.В., Костановский А.В.</i> Расчетная оценка определения теплопроводности вспученного вермикулита	135
O-659. <i>Недялков Ю.В., Постников Е.Б.</i> Вычислительные подходы к определению изотермической сжимаемости и флуктуационного параметра жидкостей	135
O-841. <i>Фортова С.В.</i> Течение Колмогорова и его численное моделирование в плоском канале	136
O-557. <i>Власкин М.С., Жук А.З., Иванов П.П.</i> Моделирование процесса высокотемпературной вакуумной очистки оксида алюминия	137
O-842. <i>Шепелев В.В., Фортова С.В., Иногамов Н.А.</i> Применение программного комплекса Turbulence Problem Solver (TPS) для численного моделирования взаимодействия лазерного излучения с металлами	137
P-523. <i>Белов Г.В., Аристова Н.М.</i> О развитии средств термодинамического моделирования сложных высокотемпературных систем	138
P-734. <i>Барбин Н.М., Сидаш И.А., Терентьев Д.И., Алексеев С.Г.</i> Компьютерное моделирование теплофизических свойств системы радиоактивный графит- CO_2	139

P-715.	<i>Паукова А.Е., Шульц О.В., Пешкичев И.В., Пугачев В.Ю.</i> Использование термодинамического моделирования при расчётах материального баланса технологии зятц	139
P-626.	<i>Рождественский А.В.</i> Разработка базы данных термодинамических функций воздуха в широком диапазоне температур и давлений для программных комплексов расчетов гиперзвуковых течений	140
P-546.	<i>Куанышев В.Т., Сачков И.Н., Сорогин И.Г., Сорогина Т.И.</i> Синергетический механизм термического разрушения двухфазных контактных материалов . .	141
P-844.	<i>Фортова С.В., Уткин П.С.</i> Трёхмерное численное моделирование развития неустойчивости контактной границы сталкивающихся металлических пластин в газодинамическом приближении	141

11. THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF MATERIALS FOR NUCLEAR POWER ENGINEERING

I-604.	<i>Рютин С.Б., Скрипов П.В.</i> Теплообмен в сверхкритической воде	143
O-840.	<i>Чусов И.А., Диденко В.И., Обысов Н.А., Новиков Г.Е., Проняев В.Г.</i> Обработка разнородных данных экспериментов и построение рекомендуемых соотношений	143

12. THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF MATERIALS FOR AVIATION, ROCKET AND SPACE TECHNOLOGIES

O-738.	<i>Хромов М.А., Чиннов В.Ф., Саргсян М.А., Кавыршин Д.И., Щербаков В.М., Ефимов А.В.</i> Анализ разрушающего воздействия азотной плазменной струи на термостойкие материалы	145
O-827.	<i>Кашапов Н.Ф., Кашапов Р.Н., Кашапов Л.Н.</i> Теплофизические и физико-механические свойства изделий, полученных селективным лазерным сплавлением	146
O-828.	<i>Савицкий Д.В., Аксёнов А.А., Жлуктов С.В.</i> Использование технологии vof для моделирования абляции теплозащитного покрытия	146
O-836.	<i>Шавелкина М.Б., Амиров Р.Х., Тюфтяев А.С.</i> Особенность модифицирования конструкционных материалов углеродными нанотрубками и графеном, синтезированными в струе термической плазмы	147
P-826.	<i>Глушнев А.В., Савельев А.С., Сон Э.Е., Борейшо А.С., Хомский М.Ю., Васильев Д.Н.</i> Экспериментальное исследование теплопереноса и термического разрушения углеродных образцов в сверхзвуковом потоке при воздействии лазерного излучения	147

13. THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF OILS, GAS CONDENSATES, GAS HYDRATES AND NATURAL GAS

I-790.	<i>Булейко В.М., Григорьев Б.А.</i> Калориметрические методы исследования фазового поведения углеводородных смесей с низким содержанием высокомолекулярных (C4+) компонентов.	149
I-549.	<i>Базаев А.Р., Базаев Э.А.</i> Фазовые превращения и критические свойства системы 1-пропанол —н-гексан	150
O-511.	<i>Лукиянов К.В., Котов А.Н., Старостин А.А., Скрипов П.В.</i> Влияние влаги на теплоперенос в жидких углеводородах при импульсном нагреве проволочного зонда	150
O-698.	<i>Жуков С.А., Яновский Л.С., Молоканов А.А., Ильина М.А.</i> Исследование теплопередачи в углеводородных топливах при пленочном и пузырьковом кипении	151

O-708.	<i>Директор Л.Б., Синельщиков В.А.</i> Теплофизические свойства летучих продуктов низкотемпературного пиролиза биомассы	152
O-709.	<i>Яновский Л.С., Варламова Н.И., Казаков А.И., Молоканов А.А., Плишкин Н.А., Попов И.М., Ильина М.А., Ежов В.М.</i> Исследование упругости и критических температур углеводородных соединений манометрическим методом	152
O-735.	<i>Субботин Д.И., Попов В.Е., Сафронов А.А., Попов С.Д., Суров А.В., Кучина Ю.А., Образцов Н.В., Серба Е.О., Наконечный Г.В., Сподобин В.А.</i> Взаимодействие метана с плазмой углекислого газа, полученной в высоковольтном плазмотроне переменного тока	153
O-739.	<i>Никитин Е.Д., Богатищева Н.С., Попов А.П., Файзуллин М.З.</i> Теплофизические свойства компонентов биодизельного топлива и сырья для его производства	154
O-792.	<i>Богданов А.В., Григорьев Е.Б., Сокотущенко В.Н.</i> Определение скорости фазовых переходов многокомпонентной углеводородной смеси в свободном объеме	154
O-605.	<i>Игольников А.А., Скрипов П.В.</i> Исследование перегрева и критических параметров дизельного топлива при добавлении касторового масла	155
O-589.	<i>Зарипов З.И., Усманов Р.А., Гумеров Ф.М.</i> Свойства термодинамических систем, участвующих в процессе получения биодизельного топлива в суб- и сверхкритических флюидных условиях	156
O-533.	<i>Хайрутдинов В.Ф., Гумеров Ф.М., Фарахов М.И.</i> Термодинамические основы процесса экстракции углеводородов из нефтяных шламов с использованием скф пропан-бутановой смеси	156
O-806.	<i>Кияченко Ю.Ф., Дешабо В.А., Косов В.И., Юдин Д.И., Юдин И.К., Поднек В.Э.</i> Оптический метод определения пограничных кривых околокритических углеводородных смесей	157
O-556.	<i>Файзуллин М.С., Виноградов А.В., Томин А.С., Коверда В.П.</i> Гидратообразование в сверхзвуковых струях водяного пара и газа	158
P-570.	<i>Накипов Р.Р., Зарипов З.И.</i> Теплофизические свойства системы высокомолекулярное органическое соединение (нефть) - вода-скф растворитель	159
P-587.	<i>Анищенко Ю.В., Локтионов Е.Ю.</i> Состав продуктов сгорания при лазерном инициировании горючих газовых смесей в контролируемых условиях	159
P-544.	<i>Мирская В.А., Назаревич Д.А., Ибатов Н.В.</i> Экспериментальное исследование давления системы н-гептан - вода (99:1)	160
P-625.	<i>Мазанов С.В., Зарипов З.И., Гумеров Ф.М.</i> Экспериментальное исследование изобарной теплоёмкости реакционной смеси «этанол/рапсовое масло» в присутствии гетерогенного катализатора	161
P-517.	<i>Сагдеев Д.И., Габитов И.Р., Фомина М.Г., Аляев В.А., Минкин В.С., Абдулагатов И.М.</i> Вязкость и плотность вакуумных масел для диффузионных насосов	161
P-552.	<i>Ибатов Н.В., Мирская В.А., Назаревич Д.А.</i> Изохорная теплоемкость и pvt свойства бинарной азеотропной системы н-гептан-вода	162

**14. DATA DRIVEN APPROACHES IN MATERIALS DESIGN:
THEORY MEETS EXPERIMENT (MISIS)**

I-776.	<i>Colinet C., Tedenac J.P.</i> Enthalpies of formation of transition metal and rare-earth borides. a first principles study.	163
I-740.	<i>Richter K.W.</i> Modelling of phases with general nias-type structure: what can we learn from powder xrd?	163

I-612.	<i>Kim G., Gu Q., Jia H., Meschel S., Chen W., Nash P.</i> Experimental database development for data-driven materials design	164
I-680.	<i>Chen Q., Wu K., Jeppsson J., Engstrom A.</i> Precipitation simulation enabled by thermodynamic and kinetic databases	164
O-809.	<i>Platovskaia M., Fabrichnaya O.</i> Thermodynamic assessment of the Al ₂ O ₃ -MgO-TiO ₂ system	165
O-808.	<i>Saenko I., Platovskaia M., Fabrichnaya O.</i> Experimental investigation and thermodynamic modeling of the ZrO ₂ -TiO ₂ -MgO system	166
I-516.	<i>Eriksson O.</i> Data-mining approaches to find new functional materials	167
O-541.	<i>Гордеев И.С.</i> Исследование фазовой диаграммы циркония методом молекулярной динамики	167
O-641.	<i>Смирнова Д.Е., Стариков С.В., Гордеев И.С.</i> Разработка атомистической модели для прогноза свойств бинарной системы Zr-Nb	168
O-590.	<i>Горностырев Ю.Н., Коржавый П.А., Горбатов О.И., Кауцнельсон М.И.</i> Метастабильные дисперсные выделения в сплавах. модельные представления и атомистическое моделирование	168
O-606.	<i>Todorova M., Yoo S., Neugebauer J.</i> Electrochemical surface phase diagrams: solvation effects and selectivity	169
O-601.	<i>Vekilova O.Yu., Eriksson O., Herper H.C.</i> Theoretical study of magnetic properties of the 1:12 alloys	170
O-524.	<i>Simak S.I.</i> Diffusion in ionic conductors from ab initio molecular dynamics	170
O-663.	<i>Ehteshami H., Смирнова Е.А., Sun W., Коржавый П.А.</i> Механизмы атомной диффузии в карбиде титана	171
I-717.	<i>Pisch A.</i> Development of new materials using an integrated approach of dft calculations, calphad modeling and key experiments	172
I-807.	<i>Гаевичев К.С., Гуськов В.Н., Нижифорова Г.Е.</i> Термодинамические свойства термобарьерных материалов, содержащих РЗЭ	172
O-742.	<i>Баженова И.А., Кондратьев А.В., Хван А.В., Динсдейл А.Т.</i> Третье поколение термодинамического описания SiO ₂	173
O-538.	<i>Колотова Л.Н., Стариков С.В.</i> Атомистическое моделирование структурных и фазовых превращений в сплаве U-Mo при термических и радиационных воздействиях	174
I-833.	<i>Neugebauer J., Zhu L., Körtmann F., Grabowski B., Nickel T.</i> Employing ab initio thermodynamics to design structurally complex materials	174
I-845.	<i>Stepanov E.A., Lichtenstein A.I., Katsnelson M.I.</i> Effective bosonic models for collective electronic fluctuations	175
I-834.	<i>Рубцов А.</i> Подход флуктуирующего ближнего поля для сильно скоррелированных систем	175
I-831.	<i>Abrikosov I.A.</i> Theoretical physics approaches for understanding of materials: lessons from Yu. Kh. Vekilov	176
O-778.	<i>Синёва С.И., Старых Р.В., Васильева А.А., Бодуэн А.Я.</i> Установление температурных и композиционных границ твердого раствора в системе Fe-Ni-Co (Cu,Cr)	176
P-830.	<i>Abrikosova N.A., Brommesson C., Larsson E., Eriksson P., Zhangjun H., Uvdal K.</i> Optimization of the cell uptake of gadolinium oxide nanoparticles by capping with sorbitol for cell tracking in MRI	177
P-531.	<i>Skripnyak N.V., Ponomareva A.V., Belov M.P., Abrikosov I.A.</i> Elastic consants for alloys with mechanical instability: ab initio investigation of bcc Ti	177
P-558.	<i>Belov M.P., Syzdykova A.B., Ponomareva A.V., Smirnova E.A., Abrikosov I.A.</i> The importance of the lattice dynamic in the magnetic phase transition in FeRh	178

P-609. <u>Пономарева А.В.</u> , <u>Мухамедов Б.О.</u> , <u>Абрикосов И.А.</u> Расчет энтальпии растворения примеси углерода в парамагнитных Fe-Mn сплавах	178
P-637. <u>Смирнова Е.А.</u> , <u>Мосягин И.Ю.</u> , <u>Воробьев Д.А.</u> Data driven design of al alloys	179
АВТОРСКИЙ ИНДЕКС	181

АНОМАЛЬНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ЭНТРОПИЙНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Иосилевский И.Л.

¹*ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия*
iosilevskiy@gmail.com

Обсуждаются особенности т. наз. *энтропийных* фазовых переходов 1-го рода (S -ФП) [1, 2] в сравнении с обычными *энтальпийными* (Ван-дер-Ваальсовыми) переходами (H -ФП) [3]. Основным «движущим» механизмом S -переходов является принудительный распад при сжатии каких-либо связанных комплексов — атомов, молекул, кластеров и др. [4, 5] вплоть до принудительного распада адронов на составляющие их кварки («деконфайнмента») в области экстремальных состояний ультра-плотного вещества в недрах нейтронных звезд [6, 7]. Отличительным признаком S -переходов является противоположный знак скрытой теплоты перехода и, соответственно, падающая $P(T)$ -характеристика границы перехода. Прямым следствием этого является аномальная термодинамика вещества, как в пределах двухфазной области, так и в случае *изоструктурного* S -перехода в конечной зоне, примыкающей к критической точке и высокотемпературной части бинодали этого перехода. Эта аномальность проявляется [2, 6] в виде одновременной смены знака ряда обычно положительных вторых перекрестных производных термодинамического потенциала, таких как параметр Грюнайзена, коэффициент термического расширения, термический коэффициент давления и др. В свою очередь, следствием этого является аномальный порядок и взаимопересечение ряда изолиний [2, 6] (изотерм, изоэнтроп, адиабат Гюгонио и др.), а также аномалии гидродинамики ударного и изэнтропического сжатия и расширения. Примечательным атрибутом изоструктурных S -переходов является существенно более сложная структура стабильных и метастабильных зон в двухфазной области этих переходов [4 – 6] в сравнении со структурой этих зон для переходов энтальпийных (Ван-дер-Ваальсовых) [3]. Обсуждаемые аномалии S -переходов иллюстрируются на примерах диссоциативных, плазменных и других «делокализационных» фазовых переходов, зафиксированных, как в реальных экспериментах, так и в модельных построениях, а также и в прямом численном моделировании.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ В ТВЕРДОМ И ЖИДКОМ СОСТОЯНИЯХ

Станкус С.В., Абдуллаев Р.Н., Агажанов А.Ш., Козловский Ю.М., Савченко И.В., Самошкин Д.А., Хайрулин Р.А., Яцук О.С.*

ИТ СО РАН, Новосибирск-90, Россия

**stankus@itp.nsc.ru*

Представлены результаты экспериментального исследования теплофизических свойств и фазовых превращений чистых металлов и сплавов на основе щелочных и редкоземельных элементов в широком интервале температур твердого и жидкого состояний. Измерения плотности и коэффициента взаимной диффузии (293–2000 К) выполнены гамма-методом, теплового расширения (110–1800 К) — дилатометрическим, теплоемкости (200–1200 К) — ДСК, приращения энтальпии (420–1300 К) — смешением, теплопроводности и температуропроводности (293–1770 К) — лазерной вспышкой. Приведено описание экспе-

риментальных установок и методик проведения измерений. Исследовались свойства чистых Li, Na, K, Rb, Cs, Mg, Pb, Bi, Sn, In, Ni, La, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er; магнитотвердых материалов на основе Nd-Fe-B и Sm-Co; расплавов систем Li-Pb, Na-Pb, K-Pb, Rb-Bi, Cs-Bi, Li-Mg, Li-La, Mg-Pb.

Для всех исследованных материалов получены аппроксимационные зависимости свойств от температуры, определены их изменения в областях фазовых превращений, и разработаны таблицы справочных данных с оценкой их погрешностей. Уточнены фазовые диаграммы бинарных систем. Показано, что критические индексы термического коэффициента линейного расширения являются положительными, имеют разное значение выше и ниже точек магнитных превращений, и существенно превышают по абсолютной величине критический индекс теплоемкости. Установлено, что концентрационные зависимости свойств при некоторых соотношениях компонентов сильно (до 50%) отклоняются от законов идеального раствора. Это косвенно подтверждает наличие в структуре расплавов ассоциированных комплексов (с частично ионным характером межатомного взаимодействия), которые постепенно распадаются с ростом температуры.

Исследование выполнено за счет грантов РНФ, проекты № 16-19-10023 (Rb-Bi, Cs-Bi), № 17-79-10237 (РЗМ жидкие) и РФФИ, проекты 15-08-00275 (Li-Pb), № 12-08-00192 (Na-Pb), № 16-38-00669 (Li-Mg), № 15-38-20223 (магниты), № 14-08-00602 (РЗМ твердые).

СПЕКТРАЛЬНАЯ И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ РАСПЛАВА ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Петров В.А.

МГУ, Москва, Россия

vapetrov@mirea.ru

Представлены результаты анализа всех имеющихся экспериментальных данных, а также аппроксимирующих формул для спектральной и температурной зависимости коэффициента поглощения расплава оксида алюминия в области полупрозрачности от 0.3 до 8 мкм и в диапазоне температур от плавления до 3000 К. Рассматривается влияние различных физико-химических процессов на величину коэффициента поглощения.

Показано, что имеющиеся данные могут быть разделены на две большие группы по уровню поглощения. Первая группа включает результаты исследований частиц в продуктах сгорания твердых ракетных топлив, вторая – результаты исследований расплавов монокристаллов и некоторых других образцов высокочистого оксида алюминия. Расхождения в результатах различных авторов для каждой из этих групп велики. Объяснение лежит во влиянии исходного материала, условий проведения экспериментов и в больших погрешностях измерений.

На основе проведенного анализа показано, что по характеру зависимости коэффициента поглощения от длины волны и температуры расплав оксида алюминия ближе к полупроводнику, чем к диэлектрику. Длинноволновый край электронного поглощения с ростом температуры смещается в начало ИК области спектра, а коротковолновый край многофоновонного поглощения оказывает влияние вплоть до 4 мкм. Между этими двумя областями поглощения определяется свободными носителями, которые формируются из-за наличия загрязнений, примесей и дефектов в ближнем порядке расположения атомов.

При плавлении оксида алюминия имеет место скачкообразное увеличение коэффициента поглощения примерно на два порядка величины. Представлены результаты детального экспериментального исследования этого эффекта. Анализ большинства современных работ по изучению атомной структуры расплава показывает, что он имеет подобную гамма-фазе атомную координацию с множеством дефектов. Это может быть причиной высоких

значений коэффициента поглощения расплава по сравнению с монокристаллом. Однако кинетика перестройки при плавлении вплоть до настоящего времени не изучена.

STATE OF IRON IN THE EARTH CORE: PARADIGM CHANGE

Belonoshko A. B.

KTH, Stockholm, Sweden

anatoly@kth.se

There is a ball of solid (Inge Lehmann, 1934) iron (Altshuller et al., 1960) in the center of the Earth. This ball is called the Inner Core. Any theory trying to describe the past of the Earth, explain the present state of the Earth, and predict its future, has to accommodate and explain a number of enigmatic features that the Core possess. The Inner Core drives the geodynamo in the liquid Outer Core that protects the life on Earth from cosmic radiation. There is a possibility that the core-mantle boundary might be the place where heavy hydrocarbons are synthesized. The Inner Core possess low shear modulus, sound waves traveling through the Core are highly attenuated, the Core is elastically anisotropic, and there is an indication that the Inner and Outer Cores rotate with different pace. The properties of the Core are tightly connected to the way in which atoms in the iron phase are packed. The current paradigm is that the stable phase of iron in the Core is hexagonal close packed. I will demonstrate that the first principles molecular dynamics supports another phase, namely body-centered cubic phase of iron. Quite remarkable, this phase has already been observed in experiments but its signature was misinterpreted. I will demonstrate that the stability of the bcc phase allows to resolve all the existing controversies and provide explanation of all above-mentioned enigmatic features.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ УГЛЕВОДОРОДОВ НЕФТИ И НЕФТЕПРОДУКТОВ НА БАЗЕ МНОГОКОНСТАНТНЫХ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ

*Григорьев Б.А.,¹ Герасимов А.А.,² Александров И.С.*²*

¹Газпром ВНИИГАЗ, Москва, Россия, ²КГТУ, Калининград, Россия

**alexandrov_kgrd@mail.ru*

Прогнозирование термодинамических свойств и фазового поведения углеводородов нефти и многокомпонентных углеводородных смесей является достаточно сложной и не решенной в полной мере задачей. Информация о термодинамических свойствах углеводородных систем необходима при разработке технологии добычи, транспорта и переработки углеводородного сырья. Широкий диапазон рабочих параметров и углеводородного состава не позволяют обеспечивать потребности технологической практики в информации о термодинамических свойствах только на основе экспериментальных данных. Один из путей решения этой задачи — разработка аналитических моделей, базирующихся на фундаментальных уравнениях состояния, которые с одной стороны достоверно воспроизводят поверхность состояния, а с другой позволяют рассчитывать все термодинамические свойства с высокой точностью.

В докладе обобщен и представлен результат многолетней работы авторов по разработке фундаментальных уравнений состояния углеводородов, входящих в состав нефти и газовых конденсатов. Указанные индивидуальные и обобщенные уравнения состояния легли

в основу авторской методики расчета термодинамических свойств сложных углеводородных систем: нефть и газовые конденсаты, их фракции и товарные продукты различного способа выработки. Методика построена в рамках одножидкостной модели с использованием минимальной исходной информации о физико-химических свойствах вещества и его составе, определяемых стандартными лабораторными методами. Авторами также разработана процедура перехода от одножидкостной модели к модели идеального раствора для возможности прогнозирования фазового поведения сложных углеводородных смесей. Рассмотрены и другие модели раствора, учитывающие взаимодействие компонентов или псевдокомпонентов.

В докладе также обсуждается альтернативный подход, основанный на применении обобщенного уравнения состояния, полученного в рамках статистической теории ассоциированного флюида (SAFT) и обеспечивающий как достаточно высокую точность расчета термодинамических свойств, так и фазовых равновесий углеводородных систем.

ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ РАСТВОРОВ ОЖИЖЕННЫХ ГАЗОВ: ЭКСПЕРИМЕНТ, ТЕОРИЯ, МОДЕЛИРОВАНИЕ

Байдаков В.Г., Каверин А.М., Андбаева В.Н., Хотуенкова М.Н.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**baidakov@itp.uran.ru*

Дифференциальным капиллярным методом измерена капиллярная постоянная a^2 и определено поверхностное натяжение σ бинарных растворов ожигенных газов с полной ($\text{CH}_4\text{-N}_2$, $\text{O}_2\text{-N}_2$) и частичной ($\text{CH}_4\text{-He}$, $\text{C}_2\text{H}_6\text{-He}$, $\text{C}_3\text{H}_8\text{-He}$, $\text{CH}_4\text{-H}_2$, $\text{C}_2\text{H}_6\text{-H}_2$) растворимостью компонентов. Опыты проведены в интервале температур от тройной до близких к критической точке растворителя при давлениях от давления насыщения чистого растворителя до 4 МПа. Погрешность полученных данных составила 0.5–2.0 процента, где верхнее значение относится к окрестности критической точки. Температурная, барическая и концентрационная зависимости a^2 и σ представлены в аналитическом виде.

Экспериментальные данные интерпретируются в рамках метода слоя конечной толщины и теории капиллярности Ван-дер-Ваальса. По результатам молекулярно-динамического моделирования определена избыточная свободная энергия однородного флюида. С использованием одножидкостной модели построены уравнения состояния растворов исследуемых ожигенных газов. Из данных о поверхностном натяжении на плоской межфазной границе и уравнения состояния, описывающего стабильные и метастабильные области раствора, определен коэффициент влияния в функционале свободной энергии неоднородной системы. Рассчитаны адсорбция, эффективная толщина поверхностного слоя, определены положения разделяющих поверхностей в межфазном слое.

Рассматривается возможность описания поверхностных свойств газонасыщенных растворов в рамках обобщенного закона соответственных состояний. Показано, что насыщение углеводородов метанового ряда гелием приводит к изменению характера зависимости поверхностного натяжения раствора от температуры. Если для растворов гелия в метане производная $(d\sigma/dp)_T$ отрицательна во всем интервале температур от тройной до близких к критической точке, то для системы пропан-гелий производная $(d\sigma/dp)_T$ меняет свой знак с отрицательного на положительный уже при температуре близкой к температуре нормального кипения растворителя.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-08-00403) и Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 18-2-2-13).

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ЛАЗЕРНОГО НАГРЕВА В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕПЛОФИЗИКЕ

Шейндлин М.А.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

sheindlin@yandex.ru

В докладе представлен обзор новых оригинальных методов измерений свойств высокотемпературных материалов, разработанных в последнее время в Институте высоких температур РАН. Рассматриваемое направление работ связано с необходимостью расширения диапазона температур и давлений традиционной теплофизики в область окрестности точек плавления и даже критических точек наиболее тугоплавких веществ, таких как графит и сверхтугоплавкие керамики (УНТС): карбиды, дибориды и некоторые высокотемпературные оксиды. Рассматриваются различные методы экспериментов с лазерным нагревом, охватывающие диапазон давлений от вакуума до высоких статических давлений в несколько килобар. Показано, что различные свойства УНТС, а также графитовых материалов могут быть измерены с точностью, сопоставимой с обычными методами. Методы лазерного нагрева применяются для измерений различных свойств как неметаллических, так и металлоподобных веществ в конденсированном состоянии и для исследований испарения при температурах до 4500 К. Отмечается значение современных методов высокоскоростной оптической диагностики и особенно полихроматической оптической пирометрии. Этот важный вопрос подробно обсуждается и представлены различные высокоскоростные пирометры, разработанные для импульсных экспериментов. Приведен ряд экспериментальных результатов по линиям солидуса и ликвидуса в системах Zr-C, Zr-U-C, Ta-C и Hf-C наряду с данными о спектральной излучательной способности жидкой и твердой фаз в окрестности точек плавления. Представлены современные методы измерения теплопроводности и теплового расширения до экстремально высоких температур и некоторые результаты измерений до 3500 К. Также представлены некоторые данные о поведении ряда тугоплавких оксидов и смешанных оксидов вблизи области их точек плавления.

БАЗА ДАННЫХ ПО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ «ИВТАНТЕРМО-ОНЛАЙН»

*Белов Г.В.^{1,2} Дьячков С.А.^{1,3} Левашов П.Р.^{1,3} Мезинов Н.С.⁴
Минаков Д.В.^{1,3} Морозов И.В.^{*1,3} Смирнов В.Н.^{1,3}*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МГУ, Москва, Россия, ³МФТИ, Долгопрудный, Россия,

⁴МИЭМ НИУ ВШЭ, Москва, Россия

**morozov@ihed.ras.ru*

Базы данных по термодинамическим свойствам веществ играют важную роль в при решении инженерных задач, связанных с конструированием ракетных двигателей, ядерной энергетикой, разработкой химических технологий, металлургией, добычей полезных ископаемых, переработкой отходов и др. Значительный вклад в решение этих задач внесла информационная система «ИВТАНТЕРМО», разработанная в Термоцентре им. В.П. Глушко ОИВТ РАН. На данный момент база данных «ИВТАНТЕРМО» содержит сведения о термодинамических свойствах более 3400 веществ, образованных из 96 химических элементов. Кроме того, в Термоцентре ОИВТ РАН разрабатываются программы для обработки первичных экспериментальных данных, расчета равновесного состава химических реагирующих смесей, анализа данных и предсказания свойств веществ.

В связи с развитием информационных технологий возникла необходимость создания новой версии информационной системы, получившей название «ИВТАНТЕМО»

ОНЛАЙН» [1]. В отличие от предыдущей системы она основана на клиент-серверной технологии, имеет современный веб-интерфейс и широкие возможности для создания веб-сервисов по обработке данных. Данная система поддерживает контроль версий для отдельных блоков данных, хранение информации об источниках данных и методах их обработки, различные варианты поиска веществ и отображения термодинамических величин. Следует отметить, что наполнение базы происходит только в результате критического анализа имеющихся в литературе данных. Предполагается, что развитие данной системы может стать основой для создания национального центра теплофизических данных.

-
1. Belov G.V., Dyachkov S.A., Levashov P.R., Lomonosov I.V., Minakov D.V., Morozov I.V., Sineva M.A., Smirnov V.N. // *J. Phys. Conf. Ser.* 2018. V. 946. P. 012120

ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ПЕРВОПРИНЦИПНЫХ РАСЧЕТОВ

Левашов П.Р.,^{1,2} Минаков Д.В.^{1,2}*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

**pasha@ihed.ras.ru*

Критические точки большинства металлов в настоящее время неизвестны. Экспериментальное измерение критических параметров металлов очень сложно выполнить в силу чрезвычайно высоких температур (выше 3000 К) и давлений (от единиц до десятков килобар). Теоретический расчет околкритического металлического флюида представляет значительные трудности из-за вырождения электронной подсистемы и сильного взаимодействия. Существуют лишь модельные оценки критических точек, которые имеют особенно большой разброс для тугоплавких металлов [1]. Между тем, положение бинодали и критической точки на фазовой диаграмме металлов необходимо знать для построения адекватных уравнений состояния при плотностях ниже нормальной. Кроме того, в околкритической области металлов предсказаны интересные явления, в частности, переход металл-диэлектрик и образование кластеров.

Некоторую информацию о положении критических точек могут дать только импульсные эксперименты, в частности, по изоэнтропическому [2] и изобарическому [3] расширению. В экспериментах по изоэнтропическому расширению с пористыми образцами удается наблюдать испарение металла при его расширении в различные преграды. Изобарическое расширение под действием мощных импульсов тока позволяет исследовать свойства вещества вблизи кривой фазового равновесия жидкость–пар. Однако, до недавнего времени не существовало моделей, которые могли бы непротиворечиво описать оба этих типа данных, в частности, для вольфрама и молибдена. В данной работе будет представлен обзор подходов для определения критических параметров тугоплавких металлов. Также будут обсуждаться результаты квантовых молекулярно-динамических расчетов для интерпретации экспериментальных данных и оценки критических параметров тантала, вольфрама и молибдена.

-
1. Minakov D. V., Paramonov M. A., Levashov P. R. // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 97. P. 024205.
 2. Gudarenko L. F. , Gushchina O.N. , Zhernokletov M. Yu., Medvedev A.B. and Simakov G. V. // *High Temp.* 2000. V. 38. P. 413.
 3. Gathers G. R. // *Rep. Prog. Phys.* 1986. V. 49. P. 341.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕРМОИНТЕРФЕЙСНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ТЕРМОСТАБИЛИЗАЦИИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ

Дмитриев А. С.

МЭИ, Москва, Россия

asdmiriev@mail.ru

В последние годы активно возрос интерес к созданию новых наноматериалов для перспективных задач электроники, оптоэлектроники и энергетики. Появление новых функциональных материалов для слаботочной и сильноточной электроники и энергетики продиктованы активным развитием наноэлектроники и наноэнергетики. Особый интерес представляют теплофизические свойства поверхностей новых функциональных наноматериалов, поскольку от них зависят многочисленные приложения и новые тренды развития перспективных технологических направлений.

В работе приведены результаты исследований в области разработки, создания и исследования теплофизических свойств новых гибридных нанокompозитов на основе металлических монодисперсных микросфер, полимеров и графеновых хлопьев. Представлены результаты по технологии создания подобных гибридных композитов, изучения свойств смачивания и растекания капель различных рабочих жидкостей на поверхностях гибридных композитов. Рассмотрены экспериментальные и теоретические результаты по исследованию переноса тепла (теплопроводности) в таких гибридных нанокompозитах. Особое внимание уделяется результатам изучения теплофизики и гидродинамики при испарении и кипении капель на перегретых поверхностях гибридных графеновых нанокompозитов, построены карты режимов, условия существования и подавления эффекта Лейденфроста.

Многообразие свойств новых нанокompозитов на основе графеновых хлопьев позволяет в будущем создавать функциональные энергетические материалы с управляемыми теплофизическими свойствами как на поверхности, так и в объеме материала.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 17-19-01757).

РАСЧЁТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ АВИАЦИОННОЙ ТЕХНИКИ

Славин А. В.

ФГУП ВИАМ, Москва, Россия

slavinav@viam.ru

В докладе обсуждаются следующие вопросы теплофизических свойств материалов для авиационной техники:

1. Технология многомасштабного моделирования «материал-технологии-конструкции»;
2. Экспериментальное исследование влияния теплофизических свойств на процессы формирования структуры сплавов;
3. Расчётно-экспериментальное определение теплопроводности высокопористого волокнистого термодинамически стабильного материала тепловой защиты;
4. Решение задачи весовой эффективности элемента теплозащитной конструкции;
5. Моделирование тепло- и массообмена в аблирующих теплозащитных материалах;
6. Оптимизация состава и структуры керамоподобных материалов форм для литья жаропрочных сплавов;
7. Расчётно-экспериментальные исследования теплообмена при отверждении многослойных крупногабаритных конструкций из полимерных композиционных материалов.

**УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И МЕТАЛЛИЗАЦИЯ В ПАРАХ МЕТАЛЛОВ
И ИНЕРТНЫХ ГАЗАХ**

*Хомкин А.Л., Шумихин А.С.**

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**shum_ac@mail.ru*

Эффект металлизации плотных паров металлов [1], инертных и молекулярных газов (см. [2]), обнаруженный экспериментально уже давно обсуждается в литературе [3]. Металлизация паров проявляет себя в росте проводимости вплоть до минимальной металлической. Необычное объяснение эффекта металлизации в парах металлов было предложено в [4] с использованием химической модели "3+". Рост проводимости паров при сжатии объяснялся проявлением новой компоненты – электронного желе ("+" в названии к традиционным электронам, ионам и атомам). Желе возникает из хвостов электронной плотности основного состояния всех атомов, лежащих вне атомарных ячеек Вигнера-Зейтца. В настоящей работе с использованием модели "3+" выполнен расчет теплофизических и транспортных свойств плазмы как паров металлов, так и плотных инертных газов. Проводится сравнение с имеющимися экспериментальными данными и существующими теориями [1, 2]. Проведен сравнительный анализ роли электронного желе, межрядовых и межатомных взаимодействий в плотной плазме инертных газов и паров металлов. Предложенная нами простая модель плазменного флюида достаточно успешно использована в околоскритической области паров металлов, а теперь и для плотной плазмы инертных газов. Введение в модель новой компоненты – электронного желе, позволило понять и решить ряд проблем физики неидеальной плазмы.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований президиума РАН No. 13 "Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии".

-
1. DeSilva A.W., Rakhel A.D. // *Contrib. Plasma Phys.* 2005. V. 45. P. 236.
 2. Фортов В.Е., Терновой В.Я., Жерноклетов М.В. и др. // *ЖЭТФ.* 2003. Т. 124. С. 288.
 3. Фортов В.Е., Храпак А.Г., Якубов И.Т. *Физика неидеальной плазмы.* Москва: Физматлит, 2010.
 4. Хомкин А.Л., Шумихин А.С. // *ЖЭТФ.* 2017. Т. 151. С. 1169.

**ПЛАЗМЕННЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ВОДОРОДЕ ПРИ ВЫСОКИХ
ДАВЛЕНИЯХ**

*Норман Г.Э., Саитов И.М.**

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**saitovlnur@gmail.com*

Предположение о существовании металлического водорода выдвинуто Вигнером и Хантингтоном в 1935 г. Резкое увеличение коэффициента отражения водорода было обнаружено при давлении 495 ГПа и температуре 5.5 К, что интерпретировалось как переход твердого водорода в проводящую фазу. В работе сделан обзор теоретических и экспериментальных работ, а также предложений о практических приложениях металлического водорода. Упор сделан на последние теоретические и экспериментальные исследования и

оригинальные результаты авторов доклада. В рамках теории функционала плотности и квантовой молекулярной динамики рассчитаны зависимости давления, электропроводности и протон-протонные парных корреляционных функций (ПКФ) от плотности в диапазоне $1.14 - 2.0 \text{ г/см}^3$ при температурах 50 и 100 К. Рассчитанный диапазон давлений 300 – 1200 ГПа, т.е. твердая фаза. Расчеты проводятся с использованием пакета VASP. В качестве начальной конфигурация используется моноклинная решетка группы $C2/c$, так как данная структура является наиболее устойчивой в области давлений выше 260 ГПа, что при рассматриваемых температурах соответствует фазе III твердого водорода. Обнаружен структурный переход при давлении 607 ГПа, характеризующийся заметным скачком электропроводности и резким уменьшением числа молекул H_2 . При значении плотности 1.563 г/см^3 и давления 607 ГПа происходит исчезновение пика ПКФ на расстоянии 0.74 \AA , соответствующем межатомному расстоянию в молекуле H_2 , что является указанием на распад молекул H_2 . При этом резко увеличивается значение электропроводности до $85300 \text{ (Ом}\cdot\text{см)}^{-1}$ и возникает пик ПКФ на расстоянии 0.92 \AA . Это расстояние равно межпротонному расстоянию в молекулярном ионе H_3^+ . Такое положение первого максимума ПКФ остается неизменным в диапазоне давлений 607 – 832 ГПа. Это говорит о неявном появлении ионов H_3^+ в структуре твёрдого водорода при его переходе в проводящее состояние. Таким образом, природа перехода сочетает ионизацию со структурными изменениями. При дальнейшем сжатии первый максимум ПКФ начинает соответствовать среднему расстоянию между протонами при заданной плотности, что указывает на полную диссоциацию ионов водорода. Сильная ионизация при фазовом переходе в плотном твердом водороде/дейтерии сближает этот переход с плазменным фазовым переходом во флюиде водорода.

РАСШИРЕННОЕ ОПИСАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА С ПОМОЩЬЮ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ С МАЛЫМ ЧИСЛОМ ПАРАМЕТРОВ

*Безверхий П.П.,¹ Мартынец В.Г.,*¹ Каплун А.Б.,² Мешалкин А.Б.²*

¹ИИХ СО РАН, Новосибирск, Россия, ²ИТ СО РАН, Новосибирск-90, Россия

**mart@niic.nsc.ru*

Предложено новое комбинированное термическое уравнение состояния (УС) с малым числом подгоночных параметров, описывающее как регулярную, так и критическую области изменения параметров системы. Этим уравнением аппроксимированы экспериментальные p, ρ, T -данные CO_2 в интервалах их измерений ($0 < \rho/\rho_c < 2, 217\text{K} < T < 430\text{K}, 0 < p \leq 25 \text{ МПа}$). Массив p, ρ, T -данных состоял из 731 точки. Предлагаемое УС является явной функцией ρ, T и записывается в виде:

$$p/p_c = (1 - Y)p_{reg}/p_c + Yp_{scal}/p_c.$$

УС включает новую регулярную часть p_{reg} для аппроксимации p, ρ, T — данных вне критической области, сингулярную масштабную часть p_{scal} для критической области и переходную (кроссоверную) функцию Y . Сравнение результатов расчета давлений по этому УС в том числе и вне интервалов аппроксимации с экспериментальными и справочными табличными данными до 200 МПа показало их совпадение в пределах погрешности данных. Высокая точность аппроксимации термических данных CO_2 предложенным уравнением позволила, используя коэффициенты этого УС, с помощью известных термодинамических соотношений рассчитать поведение других, в том числе и калорических величин в указанной области изменения параметров системы. Были вычислены изохорная теплоемкость, энтальпия, адиабатическая скорость звука. Сравнение полученных значений с известными

экспериментальными данными показало их хорошее совпадение. Таким образом, предлагаемое комбинированное УС позволяет разработать справочные таблицы по термодинамическим свойствам CO_2 в широкой области состояний, включая критическую область. Используя новое уравнение состояния, включающее регулярную и масштабную части с относительно малым числом (до 20) подгоночных констант, можно также рассчитывать калорические свойства и скорость звука других жидкостей.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СМЕСЕЙ С МАЛОПАРАМЕТРИЧЕСКИМ УРАВНЕНИЕМ СОСТОЯНИЯ КОМПОНЕНТОВ

Маевский К.К.

ИГиЛ СО РАН, Новосибирск, Россия

konstantin@hydro.nsc.ru

Представлены результаты численных экспериментов по моделированию ударно-волнового нагружения пористых и сплошных гетерогенных смесей, включающих в свой состав в качестве компонента вольфрам. Модель основана на предположении, что все компоненты смеси, включая газ, при ударно-волновом нагружении находятся в термодинамическом равновесии (model TЕС - thermodynamic equilibrium components). Конденсированные фазы описываются мало параметрическим уравнением состояния типа Ми-Грюнайзена [1, 2].

Интерес к исследованиям сжимаемости порошковых смесей с вольфрамом в качестве компонента связан как с возможностью создания материалов с необходимыми свойствами, так и со свойствами самого вольфрама. Уравнение состояния, которое используется для компонентов, содержит только один подгоночный параметр, который позволяет описывать данные, полученные на основании экспериментов при максимальных сжатиях. Параметры модели, позволившие достоверно описывать термодинамические параметры ударно-волнового нагружения чистых материалов использовались для моделирования смесей, включающих вольфрам в качестве компонента. Показано, что данная модель позволяет достоверно описывать ударно-волновое нагружение смесей различных составов [3].

-
1. Кинеловский С.А., Маевский К.К. Модель поведения алюминия и смесей на его основе при высоком динамическом воздействии // ТВТ. 2014. Т. 52. № 6. С. 843–851.
 2. Кинеловский С. А., Маевский К. К. Моделирование ударно-волнового нагружения многокомпонентных материалов, включающих в свой состав висмут // ТВТ. 2016. Т. 54. Вып. 5. С. 716–723.
 3. Maevskii K.K and S.A. Kinelovskii Thermodynamic parameters of mixtures with epoxy as a component under shock wave loading // Journal of Physics: Conf. Series 2018. V. 946. P. 012113.

РАСЧЕТ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИПТОНА И КСЕНОНА НА ОСНОВЕ ФРАКТАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Магомедов Р. А.,*¹ Ахмедов Э. Н.,¹ Мейланов Р. Р.,¹ Бейбалаев В. Д.,^{1,2}
Аливердиев А. А.^{1,2}

¹ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия, ²ДагГУ, Махачкала, Россия

*ramazan_magomedov@rambler.ru

Актуальность исследования новых материалов и веществ (определение теплофизических параметров) в связи с развитием новых технологий в промышленности привели к выводу новых уравнений состояний веществ и развитию методов расчета теплофизических свойств веществ, в том числе с применением интегро-дифференцирования дробного порядка.

Необходимость расчетных данных теплофизических свойств веществ при высоких температурах и давлениях близких к экстремальным возникает в связи со сложностью экспериментального исследования таких состояний.

Переход от обычных производных к производным дробного порядка связан с принципами физики многочастичных систем и реализован на основе обобщения термодинамики. Из полученного «фрактального» уравнения состояния $P = \rho T \frac{R}{M} \left\{ 1 + \rho B + (1 - \alpha) \left[\ln \left(\frac{\epsilon M}{\rho N_A} \left[\frac{mkT}{2\pi h} \right]^{3/2} \right) + \psi(1) - \psi(2 - \alpha) - \rho B \right] \right\}$ можно определить показатель производной дробного порядка α и далее рассчитать термодинамические характеристики, пользуясь полученными аналитическими выражениями для энтропии и изохорной теплоемкости [1]. Переход к классической термодинамике получается в частном случае, когда показатель производной дробного порядка равен единице.

На основе «фрактального» уравнения состояния с учетом второго вириального коэффициента B проведен расчет теплофизических параметров криптона Kr и ксенона Xe: энтропии S и изохорной теплоемкости C_V . Полученные результаты хорошо согласуются со справочными данными, отклонение для значений энтропии $\sim 0,03\%$, для теплоемкости $-\sim 2,4\%$, что позволяет надеяться на перспективность предлагаемого метода.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 16-08-00067а.

1. Magomedov R.A., et al.//ЖТАС, 2018. Р. 1-6. doi: 10.1007/s10973-018-7024-2

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ СОВМЕСТНЫХ ТЕРМИЧЕСКИХ И АКУСТИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ

Кузнецов К.И., Сухих А.А., Гранченко П.П.,* Скородумов С.В.

МЭИ, Москва, Россия

*granchenkop@gmail.com

Применение новых рабочих тел паротурбинных установок, способных составить достойную конкуренцию традиционному пароводяному циклу, является одним из перспективных направлений при расширении фундаментальных основ теплоэнергетики [1]. К таким веществам относятся перфторсоединения: октафторпропан (C3F8), декафторбутан (C4F10) и октафторциклобутан (с-C4F8). Сегодня существует потребность в накоплении данных о теплофизических свойствах в диапазоне параметров работы энергетических установок, поскольку перечисленные вещества ранее использовались [2, 3], преимущественно, в качестве хладагентов. Комплексное исследование термодинамических свойств, включающее в себя измерения плотности и скорости звука в зависимости от давления

и температуры, как свойств, исследуемых наиболее точно, позволяет рассчитать и другие термодинамические функции [4, 5]. Приведен вывод формул для расчета изобарной и изохорной теплоемкостей на основе математического аппарата термодинамики [6]. Расчет представлен на базе новых экспериментальных данных о термических и акустических свойствах октафторциклобутана в жидкости.

1. Sukhikh A. A., Miljutin V. A., Antanenkova I. S. // Thermodynamic efficiency of carbon fluorines. // Power plants. 2010. V. 415. No. 10. P. 2-8.
2. Granchenko P. P., Sukhikh A. A., Kuznetsov K. I. // Thermodynamic analysis of use of fluorocarbon working fluids in power generating units of small scale power plants // Safety and Reliability of Power Industry. 2017. V. 10. No. 4. P. 310-315.
3. REFPROP 9.0: Reference Fluid Thermodynamic and Transport properties: Copyright 2010 by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the USA.
4. Granchenko P. P., Kuznetsov K. I., Sukhikh A. A., Skorodumov S. V. // Experimental measurements of the density of octafluorocyclobutane in the field of operation parameters of thermal power plants // Safety and Reliability of Power Industry. 2016. No. 3(34). P. 35-38.
5. Kuznetsov K. I. Sukhikh A. A., Skorodumov S. V., Granchenko P. P. Proceedings of the VII All-Russian Scientific and Technical Conference : Power: Condition, Problems, Prospects Orenburg, 2014, p. 66-70.
6. Sychev V. V. Differential equations of thermodynamics. Publ. 3. P. 161-165.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДАВЛЕНИЯ НАСЫЩЕННЫХ ПАРОВ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАНЫМ ИХ РАСТВОРИМОСТИ В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ CO₂

Билалов Т.Р., Гумеров Ф.М.*

КГТУ, Казань, Россия

**t.bilalov@yandex.ru*

В работе представлен метод описания растворимости веществ в сверхкритическом CO₂, основанный на уравнении состояния реальных газов Пенга-Робинсона, а также однопараметрического закона смешивания Мухопадхьяи и Рао [1]. Алгоритм расчета включает в себя давление насыщенных паров растворяемого вещества при температуре процесса. В случае отсутствия надежных экспериментальных данных это значение определяется различными расчетными методами [2]. Большинство расчетных методов основаны на уравнении Клаузиуса-Клапейрона, и используют в качестве исходных данных критические параметры исследуемого вещества, а также, как правило, нормальную температуру кипения. Различными авторами были предложены уникальные методы расчета давления насыщенных паров, результаты по которым отличаются порой на несколько порядков. В работе представлены результаты исследования влияния методов определения давления насыщенных паров вещества, растворяемого в сверхкритическом CO₂, на точность описания растворимости. Показано, что в большинстве случаев эти методы не позволяют описывать экспериментальные данные по растворимости вещества в СК-CO₂ с приемлемой (до 10-12

1. Mukhopadhyay, M. Thermodynamic modeling for supercritical fluid process design / M. Mukhopadhyay, G. V. R. Rao // Ind. Eng. Chem. Res. - 1993. - № 32. - P. 922 - 930
2. Рид Р., Праусниц Д., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия. 1982. 592с.
3. Solubility in Supercritical Carbon Dioxide, Ram B. Gupta, Jae-Jin Shim, CRC press, ISBN: 0849342406, 960p.

ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ R1234yf**Рыков В.А., Рыков С.В.,* Свердлов А.В.**

СПбГУИТМО, Санкт-Петербург, Россия

*toggl@yandex.ru

На основе феноменологической теории критической точки и гипотезы Бенедика разработано фундаментальное уравнение состояния R1234yf в виде следующего выражения для свободной энергии Гельмгольца F :

$$F(\rho, T) = F^0(\rho, T) + RT\omega \sum_{i=0} \sum_{j=0} C_{ij}\tau_1^j (\Delta\rho)^i + F_{nreg}(\rho, T), \quad (1)$$

где $F^0(\rho, T)$ — идеально-газовая составляющая F ; $\Delta\rho = \omega - 1$; $\omega = \rho/\rho_c$; ρ_c — критическая плотность; T_c — критическая температура; R — газовая постоянная; C_{ij} — постоянные коэффициенты.

Функция $F_{nreg}(\rho, T)$ — нерегулярная составляющая свободной энергии Гельмгольца:

$$F_{nreg}(\rho, T) = \frac{p_c}{\rho} \phi(\omega) |\Delta\rho|^{\delta+1} a(x), \quad (2)$$

где $a(x)$ — масштабная функция; $x = \tau/|\Delta\rho|^{1/\beta}$; $\tau = T/T_c - 1$; β и δ — критические индексы; $\phi(\omega)$ — регулярная функция; p_c — критическое давление.

Для расчета параметров функции (2) использованы результаты работы [1]. Рассмотрены два варианта выбора масштабной функции $a(x)$: (i) на основе феноменологической теории критической точки Мигдала А.А. [2]; (ii) на основе нового представления масштабной гипотезы [3]. В результате разработано уравнение состояния R1234yf, имеющее следующую рабочую область: по температуре 230–400 К и давлению до 20 МПа. Проведено сравнение с известными экспериментальными данными о равновесных свойствах R1234yf и фундаментальным уравнением состояния [4].

-
1. Лысенков В.Ф., Рыков В.А. // ТВТ. 1991. Т. 29. С. 1236.
 2. Kudryavtseva I.V., Rykov S.V. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2016. V. 90. P. 1493.
 3. Rykov S.V., Rykov V.A., Kudryavtseva I.V. // XXXI International Conference on Equations of State for Matter. 2016. P. 62.
 4. Richter M., McLinden M.O., Lemmon E.W. // J. Chem. Eng. Data. 2011. V. 56. P. 3254.

О КРУГЛЫХ ДАТАХ, ОСТРЫХ ВОПРОСАХ И РЕШЕНИИ ПРОБЛЕМ МАЛОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ МЕТОДОМ ЛОГИЧЕСКОЙ АБДУКЦИИ**Петрик Г.Г.**

ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

galina_petrik@mail.ru

Знаменитому родоначальнику одного из двух направлений при конструировании уравнений состояния (УС) — малопараметрических и многоконстантных — УС Ван-дер-Ваальса через пять лет «стукнет» 150. Среди сотен его модификаций выделяется УС Редлиха-Квонга (в 2019 г. ему будет 70 лет). Возродив интерес к работе Ван-дер-Ваальса, оно породило массу важных модификаций (Соаве, Пенга-Робинсона, Шмидта-Венцеля; Юздина, МакАулиффа), которые вскоре отметят круглые даты: 45 – 40 лет. Но несмотря на огромное количество давно известных УС и достигнутые успехи, задача построения и выбора оптимального малопараметрического УС не решена.

К известным малопараметрическим УС имеется много вопросов. Одни из первых – о числе параметров в «двухпараметрических» УС, о смысле параметра b различных УС, о смысле третьего параметра, о молекулярной модели, с которой принято связывать эти УС. Из непроященного смысла параметров следует основной недостаток УС вдв-типа – их слабая связь с микроуровнем. Основывая на расчетах вывод о преимуществах нового уравнения (модели термодинамического уровня), авторы обычно не касаются причин, почему это улучшение происходит, и не связывают его с изменениями модели молекулярного уровня.

Состояние проблемы в этой области отвечает методу логической абдукции. Имеются вопросы, которые не могут быть разрешены в рамках действующей модели. Если эти проблемы удастся разрешить в рамках новой модели, это будет означать ее адекватность. Новая молекулярно-термодинамическая модель построена нами на основе самой простой микромодеи – взаимодействующих точечных центров. Получены семейства малопараметрических физически обоснованных реалистических термических уравнений состояния (ФОРТУС). В рамках этой модели удастся получить ответы на многие вопросы, имеющиеся к УС вдв-типа, что и означает адекватность нового УС. Заметим, что УС взаимодействующих центров исполнится 10 лет в следующем году (см. наши работы на сайте www.csmos.ru).

УРАВНЕНИЯ ИЗОПЛЕР БИНАРНОЙ СМЕСИ В ОКРЕСТНОСТИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ЖИДКОСТЬ-ПАР В РАМКАХ ТЕОРИИ СКЕЙЛИНГА

Куликов В.Д., Беляков М.Ю.*

ИПНГ РАН, Москва, Россия

**sl-kulikov@ogri.ru*

В рамках теории скейлинга и концепции изоморфизма критических явлений в смесях [1, 2] получено аналитическое выражение, определяющее объем жидкой (или газовой) фазы бинарной смеси, находящейся в двухфазном состоянии, и исследовано его поведение на линиях постоянной средней плотности смеси ρ (изохорах), постоянной температуры или постоянного давления в смеси P . Показано, что для объема жидкой фазы на этих термодинамических путях характерно немонотонное поведение, а именно, появление максимумов. Найдены уравнения, определяющие координаты этих максимумов. В частности, показано, что на изохорах максимум объема жидкой фазы v_L , возникающий при изменении температуры системы T , появляется только при плотностях смеси меньших ее критического значения ρ_c , а величина этого максимума не превышает половины объема системы. Получены аналитические уравнения изоплер в переменных давление-температура и температура-плотность в окрестности критической точки жидкость-пар. Найдены выражения для производных от давления и плотности по температуре вдоль изоплер. Показано, что из этих выражений непосредственно следуют уравнения, определяющие положения так называемых особых точек пограничной кривой: точки максимального давления и максимальной температуры (криконденбары и крикондентермы), при которых возможно двухфазное равновесие.

-
1. Belyakov M.Yu., Gorodetskii E.E., Voronov V.P., Kulikov V.D. // Chem. Phys. 2014. V. 445. P. 53.
 2. Belyakov M.Yu., Voronov V.P., Gorodetskii E.E., Kulikov V.D. // JETP Lett. 2008. V. 88. P. 302.

**ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ АРГОНА,
УДОВЛЕТВОРЯЮЩЕЕ МАСШТАБНОЙ ГИПОТЕЗЕ И РАБОТАЮЩЕЕ В
ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР И ДАВЛЕНИЙ**

*Рыков В.А., Кудрявцева И.В., Рыков С.В.**

СПбГУИТМО, Санкт-Петербург, Россия

**togg1@yandex.ru*

В настоящей работе рассматривается фундаментальное уравнение состояния вещества (FЕoS), удовлетворяющее масштабной гипотезе критической точки. При конструировании FЕoS используется метод псевдокритических точек (РСР) [1–3]. Метод РСР основан на гипотезе Бенедека [4]. В настоящее время метод РСР получил физическое обоснование на базе феноменологической теории критической точки Мигдала А.А. [5, 6] и новом представлении масштабной гипотезы критической точки [7]. Мы показали, что на основе метода РСР можно построить FЕoS аргона, которое имеет следующие характеристики: (i) в области малых плотностей FЕoS переходит в вириальное уравнение состояния; (ii) в окрестности критической точки FЕoS преобразуется в масштабное уравнение Вайдома; (iii) рабочая зона FЕoS соответствует: по давлению ($0 \leq p/p_c \leq 740$), по плотности ($0 \leq \rho/\rho_c \leq 3.2$) и ($83.8058 \leq T \leq 2300$ К) по температуре. Мы сравнили FЕoS с некоторыми известными уравнениями состояния аргона и обсудили результаты.

1. Rykov V.A. // J. Eng. Phys. Thermophys. 1985. V. 48. P. 476.
2. Kozlov A.D., Lysenkov V.F., Popov P.V., Rykov V.A. // J. Eng. Phys. Thermophys. 1992. V. 62. P. 611.
3. Kudryavtseva I.V., Rykov V.A., Rykov S.V., Ustyuzhanin E.E. // J. Phys.: Conf. Ser. 2018. V. 946. P. 012118.
4. Benedek G.B. // Polarization Matiere et Rayonnement, Livre de Jubile en l'Honneur du Professeur A. Kastler. 1968. P. 71.
5. Migdal A.A. // Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1972. V. 62. P. 1559.
6. Kudryavtseva I.V., Rykov S.V. // Russ. J. Phys. Chem. A. 2016. V. 90. P. 1493.
7. Rykov S.V., Kudryavtseva I.V., Rykov V.A. // Scientific and Technical Bulletin of Povolzhie. 2014. No2. P. 44.

**ВЛИЯНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ НА ОБЛАСТИ
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ КОМПЛЕКСНОЙ
ПЛАЗМЫ**

*Мартынова И.А.,^{*1,2} Иосилевский И.Л.^{1,2}*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

**martina1204@yandex.ru*

С использованием приближенных уравнений состояния [1, 2] выявлено существование на фазовой диаграмме асимметричной комплексной (пылевой, коллоидной и др.) плазмы [1] обширных областей с отрицательной сжимаемостью и отрицательным давлением [3]. В связи с этим обсуждаются вопросы термодинамической устойчивости и возможность существования в равновесных двухкомпонентных системах неучтенного фазового перехода типа газ–жидкость и (или) газ–кристалл. В работе анализируется применимость исходного допущения, использованного при получении фазовой диаграммы [1], а именно линейризованного (дебаевского) экранирования макроионов микроионами, приводящего к эффективному дебаевскому потенциалу взаимодействия макроионов. Уравнение Пуассона–Больцмана решается в ячейке Вигнера–Зейтца с центральным макроионом. Рассчитаны

параметры нелинейного экранирования макроионов в ячейке [2, 3]. Обнаружено два эффекта в результате расчета: (1) приближенное деление всех микроионов на два сорта — связанных и свободных, (2) значительное уменьшение эффективного (“видимого”) заряда Z^* в сравнении с исходной величиной заряда макроиона Z за счет экранирования плотной сферой связанных микроионов. В работе обсуждаются термодинамические эффекты, возникающие вследствие нелинейного экранирования и уменьшение границ областей отрицательной сжимаемости на фазовой диаграмме комплексной плазмы. Работа проведена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН “Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии”.

-
1. Hamaguchi S., Farouki R.T., Dubin D. // Phys. Rev. E. 1997. V. 56. P. 4671.
 2. Khrapak S.A., Khrapak A.G., Ivlev A.V., Morfill G.E. // Phys. Rev. E. 2014. V. 89. P. 023102.
 3. Martynova I.A., Iosilevskiy I.L., Shagayda A.A. // IEEE Trans. Plasma Phys. 2018. V. 46. No. 1. P. 14.

ОСОБЕННОСТЬ ДВУХЧАСТИЧНОГО КОРРЕЛЯТОРА В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА РАСПЛАВА ЧИСТОГО МЕТАЛЛА

Норман Г.Э.^{1,2} Писарев В.В.^{1,2} Флейта Д.Ю.^{1,2}*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

**fleyta.du@phystech.edu*

Точка фазового перехода в веществе, несмотря на её исключительное влияние на поведение вещества, не является особенной для его термодинамических функций [1, 2].

В работе показано, что определенные двухчастичные корреляторы движения для систем расплавов чистых металлов, моделируемых с помощью метода молекулярной динамики, имеют особенности в окрестности точки фазового перехода. Временное поведение корреляторов движения, подобных описанным в работе [3], различно в стабильной жидкой и переохлажденной метастабильной фазе расплава для ряда исследуемых металлов. Дана физическая интерпретация таких пространственных корреляций дальнего порядка в метастабильных системах. Приводятся зависимости корреляционных функций в зависимости от скорости охлаждения, а также сорта и количества атомов в системе.

Данная работа была осуществлена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых ученых МК-1404.2017.8.

-
1. Андреев А. Ф., // ЖЭТФ 1963, Т. 64. No. 6. С. 2064.
 2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, Москва (1976), С. 284.
 3. Волошин В. П., Маленков Г.Г., Наберухин И. Ю., //Журн. структ. химии, Т. 54, No. 8. С. 239.

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ВОЛЬФРАМА И МЕДИ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ИЗОЭНТРОПИЧЕСКОМУ РАСШИРЕНИЮ УДАРНО-СЖАТЫХ ПОРИСТЫХ МЕТАЛЛОВ

Емельянов А.Н.

ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

emelyanov@icp.ac.ru

В работе представлены экспериментальные данные по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых вольфрама и меди. При расширении металлы достигали околокритической области фазового перехода жидкость-пар. Зарегистрированные высокие температуры при расширении ударно-сжатого пористого вольфрама в двухфазную область жидкость-пар, позволяют сделать вывод о локальных перегревах при его ударном сжатии. То есть имеет место неравномерный нагрев ударно-сжатого пористого металла при расширении, что может вносить ошибки при оценке параметров критической точки, полученной из экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых пористых образцов. Проведена оценка параметров критической точки вольфрама и меди.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ ЖИДКОСТИ, ПЛОТНОСТИ ГАЗА И ДАВЛЕНИЯ: НЕКОТОРЫЕ СОВРЕМЕННЫЕ МОДЕЛИ И ЧИСЛЕННЫЕ ДАННЫЕ НА ЛИНИИ НАСЫЩЕНИЯ H₂O

*Очков В.Ф.¹, Устюжанин Е.Е.^{*1}, Знаменский В.Е.¹, Рыков С.В.², Рыков В.А.²*

¹*МЭИ, Москва, Россия, ²СПбГУИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

**evgust@gmail.com*

В работе проведен анализ некоторых литературных источников. Эти источники представляют свойства F (плотность жидкости (ρ_l), плотность газа (ρ_g), давление (P)), которые связаны с линией насыщения в критической области. При анализе мы рассматривали аналитические формы: а) уравнения состояния (УС), среди них формуляция (IF-95), рекомендованная IAPWS для H₂O, б) уравнения ($\rho_l(\tau)$, $\rho_g(\tau)$, $P(\tau)$), включая модели Анисимова (1990, 2007), которые отражают (ρ_l , ρ_g , τ) - данные и действуют в узком интервале, $\tau = 0.002 - 0.012$, здесь $\tau = (T_c - T)/T_c$ — относительная температура. Мы обратили внимание на скейлинговые модели, $F(\tau, D, C)$. Эти модели описывают свойства $F = (\rho_l, \rho_g, f_d, f_s)$ и следуют скейлинговой теории критических явлений (ST), здесь $D = (\alpha, \beta, T_c, \rho_c \dots)$ — критические характеристики, α, β — критические показатели, C — регулируемые коэффициенты, $f_d = (\rho_l + \rho_g)(2\rho_c)^{-1} - 1$ — средний диаметр, $f_s = (\rho_l - \rho_g)(2\rho_c)^{-1}$ — параметр порядка. Нами разработана комбинированная скейлинговая модель, $F(\tau, D, C)$, которая имеет современную структуру и отвечает ST, рассчитаны значения аргументов (D, C), которые входят в модель $F(\tau, D, C)$, описывающую (ρ_l, ρ_g, τ) - данные H₂O. Последние относятся к таблицам (IF-97) и охватывают интервал $\tau = 0.002 - 0.2$.

В работе предложена комбинированная скейлинговая модель $F(\tau, D, B)$ для выражения функции $\ln(P/P_c)$ в критической области. Структура этой модели включает скейлинговую, $F_{scale}(\tau, D, B_1)$ и регулярную, $F_{reg}(\tau, B_2)$ части, здесь (B_1, B_2) — регулируемые коэффициенты. Нами получены значения аргументов (D, B), которые входят в комбинированную модель, описывающую (P, τ) - данные H₂O. Последние относятся к таблицам (IF-97) и охватывают интервал $\tau = -0.002 - 0.3$. Некоторые прикладные расчеты были выполнены с помощью моделей $F(\tau, D, C)$ и $F(\tau, D, B)$. К этим результатам относятся: а) (ρ_l, ρ_g, P, T) - данные в широком интервале температур, включая область экстраполяции $10^{-6} < \tau < 0.002$, б) значения первой и второй производных для P , а также теплота

парообразования. Сделано сравнение новых данных с результатами, относящимися к известным источникам, включая данные, полученные с помощью УС IF-95.

ИЗМЕРЕНИЕ СКОРОСТИ ЗВУКА ДЛЯ ЖИДКОГО ЖЕЛЕЗА В ОКРЕСТНОСТИ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-НЕМЕТАЛЛ

*Капильный А.Г., Кондратьев А.М., Плетнев А.Е., Рахель А.Д.**

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**rakhel@oivtran.ru*

Фазовая диаграмма железа отличается от таковой для диэлектрических флюидов. В этом случае, по-видимому, имеется две критические точки и дополнительная тройная точка [1]. Однако, для надежного обнаружения фазового перехода металл-неметалл первого рода необходима прямая регистрация этого перехода в отдельном эксперименте. Как известно, при переходе из жидкого состояния в двухфазное состояние (жидкость с мелкодисперсными пузырьками пара), скорость звука скачком уменьшается. Это свойство двухфазного состояния и будет использоваться в настоящей работе для определения положения на фазовой диаграмме линий равновесия фазового перехода жидкость-пар и перехода металл-неметалл. Для измерения скорости звука образец в форме отрезка фольги, помещается в слойку между двумя пластинами сапфира и однородно нагревается импульсом электрического тока. Экспериментальная методика [2] позволяет измерять для такого образца его объем, давление, удельную энтальпию и электропроводность. Для измерения скорости звука на тыльной поверхности образца с помощью импульса лазера возбуждается акустическое возмущение. Приход этого возмущения на фронтальную поверхность регистрируется с помощью лазерного интерферометра [3]. Скорость звука определяется как отношение измеренной толщины образца к измеренному времени прохождения по нему акустического возмущения. В настоящей работе представлены первые результаты измерения скорости звука для железа в твердом и жидком состоянии. Результаты сравниваются с литературными данными. На основании этого сравнения делается оценка погрешности этих измерений.

1. Korobenko V. N., and Rakhel A. D. // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 014208.
2. Kondratyev A. M., Korobenko V. N., and Rakhel A. D. // J. Phys.: Condens. Matter. 2016. V. 28. P. 265501.
3. Kondratyev A. M., Korobenko V. N., and Rakhel A. D. // Carbon. 2016. V. 100. P. 537.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ-ПАР ДЛЯ БОРА.

Терновой В.Я., Николаев Д.Н., Острик А.В.*

ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

**ternovoi@icp.ac.ru*

Изучены конечные состояния расширения пористого ($m = 5-8$) бора (аморфная фаза) из состояния ударного сжатия с $p = 20-30$ ГПа до давлений $0.004 - 1,55$ ГПа и нагрев поверхностного слоя образца в процессе разлета. Измерен быстрый нагрев и испарение частиц бора в атмосфере ударно-сжимаемого гелия при скоростях ударной волны в нем от 9 км/с до 16 км/с. Определено положение критической точки перехода жидкость-газ бора на p - T диаграмме: $p = 1.05$ ГПа, $T = 8100$ К. Ошибка определения давления и температуры

критической точки по результатам выполненных экспериментов оцениваются в 0.14 ГПа и 400 К.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 18-08-00964 А.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ ГАЗОВОЙ СИСТЕМЫ ГЕЛИЙ-АЗОТ-НЕОН ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Милютин В. А.

МЭИ, Москва, Россия

mva.z@yandex.ru

На кафедре ТОТ (Теоретические основы теплотехники) была создана экспериментальная установка по измерению плотности тернарной газовой системы He–N₂–Ne при температурах 100 – 300 К и давлениях до 16 МПа. В установке реализован метод пьезометра постоянного объема. Смеси приготавливались из чистых газов-компонентов. Чистота азота – 99,999 об.%, гелия – не менее 99,993 об.%, неона – 99,999 об.%. Установка состоит из трех основных узлов – смесителя, пьезометрической ячейки и газометра. Количество вещества в пьезометре определялось волюметрическим методом – с помощью газометра. Температура в основных узлах установки измерялась с помощью платиновых термометров типа ТСПН-1 и ПТС-10 и потенциометра типа Р-348 и Р-363-2. Давление – с помощью измерительных преобразователей давления типа ИПДЦ и комплекта из U-образного манометра и катетометра типа В-630. В пьезометре имеется балластный объем при переменной температуре. Температурное поле этого объема измерялось с помощью медь-константановых термопар. Криостатирование пьезометрической ячейки осуществляется газообразным азотом, полученным при кипении жидкого азота в сосуде Дьюара. Система регулирования температуры в пьезометре построена на базе регулятора температуры типа ВРТ-3, чувствительным элементом в ней используется медный термометр сопротивления. Качество регулирования составляло ±0,005 К. Сосуды смесителя и газометра термостатировались в двух жидкостных термостатах при комнатных температурах. Точность измерения плотности смеси данной установкой оценена: максимальная в 0,3 – 0,6%; вероятностная 0,1 – 0,2% (с доверительной вероятностью 0,95).

В эксперименте были приготовлены три смеси с мольными концентрациями ($x_{\text{He}}/x_{\text{Ne}}$): 0,33/0,33; 0,16/0,24; 0,24/0,59. Была получена серия экспериментальных изотерм: 100 К, 115 К, 125 К, 140 К, 190 К, 250 К, 294 К.

Для данной тернарной системы в открытом доступе была найдена единственная экспериментальная работа [1].

-
1. Robert J. Burch, Low Temperature Phase Equilibria of the Gas-Liquid System Helium-Neon-Nitrogen. J. Chem. Eng. Data, 1964, 9 (1), pp 19–24.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМ ВОДА–АЛИФАТИЧЕСКИЙ СПИРТ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ПАРАМЕТРОВ СОСТОЯНИЯ

Османова Б.К.,* Базаев Э.А., Базаев А.Р.

ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

*badji@mail.ru

Экспериментальные p, ρ, T -зависимости систем вода–спирт (метанол, этанол, 1-пропанол) для значений состава x (0.2, 0.5, 0.8 мольных долей спирта) вдоль линии равновесия фаз, в однофазной (жидкой, паровой) и в сверхкритической областях описаны полиномиальным уравнением состояния в виде разложения фактора сжимаемости $Z = p/RT\rho_m$ в ряды по степеням плотности и температуры [1]: $Z = \frac{p}{RT\rho_m} = 1 + \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^s a_{ijk} \omega^i x^k / \tau^i$, откуда

$$p = RT\rho_m \left[1 + \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^n a_{ij} \omega^i / \tau^i \right], \quad (1)$$

где ρ_m — молярная плотность (моль/м³); $\omega = \rho/\rho_k$, $\tau = T/T_k$ — приведенная плотность и приведенная температура соответственно; ρ_k , T_k — критическая плотность и критическая температура; $R=8.314$ Дж/(мольК) — универсальная (молярная) газовая постоянная.

Среднее относительное отклонение рассчитанных значений давления по уравнению (1) от экспериментальных составляет 1.1 %.

По уравнению (1) и термодинамическим соотношениям [2, 3] рассчитаны основные термодинамические свойства исследованных систем: коэффициент изотермической сжимаемости K_T , коэффициент объемного термического расширения α , коэффициент давления β , внутреннее давление p_b , изохорная теплоемкость C_v , изобарная теплоемкость C_p , скорость звука w , показатель адиабаты k , энергия Гельмгольца F , энергия Гиббса G , энтропия S , энтальпия H , внутренняя энергия U , дифференциальный изотермический дроссельный эффект d^{is} , дифференциальный адиабатный дроссельный эффект d_{ad}

1. Сычев В.В., Вассерман А.А. и др. Термодинамические свойства азота. М.: Изд-во стандартов. 1977. 352 с.
2. Шпильрайн Э.Э., Кессельман П.М. Основы теории теплофизических свойств веществ. М.: Энергия. 1977. 248 с.
3. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Пер. с англ. под ред. Б.И.Соколова. Л.: Химия. 1982. 592 с.

АНОМАЛИИ ПРОФИЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ В ЛОВУШКАХ В ПРИБЛИЖЕНИИ ЛОКАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

Чигвинцев А.Ю.,¹ Иосилевский И.Л.,^{*1} Ногина Л.Ю.²

¹МФТИ, Долгопрудный, Россия, ²РГАУ-МСХА, Москва, Россия

*iosilevskiy@gmail.com

Приближение “желе”, т.е. замена системы дискретных частиц (электронов и/или ионов) гипотетической псевдожидкостью с чисто локальными (т.е. зависящими только от плотности в данной точке) свойствами, широко используется в электростатике, при расчетах

равновесного распределения заряженных частиц в окрестности источника неоднородности. В этом приближении используется локальное уравнение состояния (УРС), которое связывает локальное давление, энергию и химический потенциал заряженных частиц с локальной плотностью и температурой. В большинстве случаев используется УРС идеального газа. Основным эффектом использования неидеального УРС заключается в появлении разрывов в профиле равновесного, пространственного распределения зарядов [1, 2]. В работе детально проанализированы и проиллюстрированы свойства и параметры этих аномалий в неоднородных подсистемах ионов. В частности, выполнены расчеты профилей микроионов в “экранирующем” облаке вокруг макроиона в “комплексной плазме” (пылевая плазма, коллоидная плазма и т.д.), равновесного профиля ионов в ионной ловушке при наличии внешнего электростатического потенциала и профиля микроионов около “заряженной стены”. Для проведения расчетов в приближении локального УРС в данной работе было сконструировано многофазное уравнение состояния ионной подсистемы на базе модели классических заряженных твердых сфер на однородно сжимаемом компенсирующем электростатическом фоне (HS-ОСР).

1. Iosilevski I 1985 High Temperature 23 807
2. Chigvintsev A and Iosilevskiy I 2012 Contrib. Plasma Phys. 52 229

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ОБЪЕМНЫЕ СВОЙСТВА ТРОЙНОЙ СИСТЕМЫ ВОДА-1-ПРОПАНОЛ-Н-ГЕКСАН ВБЛИЗИ КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКИ

Абдулагатов И.М., Базаев А.Р., Базаев Э.А., Османова Б.К.*

ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

**emilbazaev@gmail.com*

Фазовое равновесие в рассматриваемой тройной системе исследована при низких температурах [1–3] и при высоких температурах [4]. В данной работе методом безбалластного пьезометра постоянного объема [5] получены значения p, ρ, T -зависимостей системы вода–1-пропанол–н-гексан состава 0,3333 мольных долей компонентов в широком диапазоне параметров состояния.

Методом излома изохор в p, T -плоскости определены параметры точек фазовых превращений жидкость–пар p_s, ρ_s, T_s и параметры критического состояния p_k, ρ_k, T_k . Зависимость давления от плотности и температуры в однофазной и сверхкритической областях, а также вдоль кривой сосуществования фаз, описана многопараметрическим полиномиальным уравнением состояния – в виде разложения давления в ряды по степеням приведенной плотности $\omega = \rho/\rho_k$ и приведенной температуры $\tau = T/T_k$: $p = RT\rho_m \left[1 + \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^n a_{ij} \omega^i / \tau^j \right]$. Средняя относительная погрешность отклонений рассчитанных значений давления от экспериментальных не превышает 1,3 % во всем интервале температур и давлений. Сделан вывод, что объемное поведение исследованной тройной системы равных мольных долей компонентов аналогично поведению индивидуального вещества.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№18-08-00124 А).

1. Jones J.H., Hopson W.H. Ternary Solubility Data for Systems Involving 1-Propanol and Water // J.F.Ind. and Eng. Chemistry. 1953. V.45. N.2. P.454-456.
2. Воробьева А.И., Карапетянц М.Х. Взаимная растворимость в системах вода-алифатический спирт-н-алкан // ЖФХ. 1967. Т.41. №5. с.1144-1149.

3. Hiroshi S., Takashi K. Liquid-Liquid Equilibrium Data for Three Ternary Systems of Aqueous Alcohol Solutions and Applicability of the Analytical Solutions of Groups // J. of Chem. Eng. of Japan. 1977. V.10. N5. P.400-402.
4. Расулов С.М., Расулов А.Р. Фазовое равновесие и PVT-свойства тройной системы $0.7223 H_2O + 0.1242 C_6H_{14} + 0.1535 C_3H_7OH$ // ТВТ.2005,Т.43. N.1. с.45-50.
5. Базаев А.Р. p,v,T,x-измерения и термодинамические свойства водных растворов углеводов в сверхкритических условиях: Дисс. докт. техн. наук. Махачкала. 1997. 264с.

ТЕПЛОВЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ОБРАБОТКЕ ОСНОВНЫХ КОМПОНЕНТОВ ПРИРОДНЫХ БИОСИСТЕМ В СРЕДЕ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

Яруллин Л.Ю., Зарипов З.И., Гумеров Ф.М.*

ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия

**yarul.lenar@gmail.com*

На примере предварительной обработки чайного листа сверхкритическим диоксидом углерода показано значительное увеличение экстрактивности физиологически активных веществ природного материала при последующей их жидкостной экстракции. При взаимодействии полимерных материалов с суб- и сверхкритическими флюидными средами, как правило, происходит их набухание, вследствие чего молекулярная структура, локальная динамика и свободный объем этих полимеров могут и претерпевают весьма существенные изменения. Данное представляет большой теоретический и практический интерес, поскольку от типов молекулярного движения, которые имеются в полимере, существенным образом зависят его механические, тепловые, диэлектрические и диффузионные свойства. Приведены результаты измерения тепловых эффектов в зависимости от давления и различных температурах, возникающих при обработке основных компонентов чая (кофеина, целлюлозы, чайного листа) сверхкритическим диоксидом углерода. Исследованиями установлен различный характер изменения теплоты растворения рассмотренных веществ и сверхкритического диоксида углерода. Приведено сравнение теплоты растворения в сверхкритическом диоксиде углерода основных компонентов чайного листа, из которого видно, что значения энтальпии кофеина и целлюлозы имеют практически одинаковые значения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-19-00478)

-
1. Яруллин Л.Ю., Гумеров Ф.М., Truong N.H., Гильмутдинов И.И., Зарипов З.И., Габитов Ф.Р., Ремизов А.Б. Бутлеровские сообщения. 2016. Т.48. №11. С.88-100.
 2. Z.I. Zaripov, S.A. Burtsev, A.V. Gavrilov, G.Kh. Mukhamedzyanov. Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2002. Vol.36. No.4. P.400-405.
 3. Z.I. Zaripov, S.A. Burtsev, A.V. Gavrilov, G.Kh. Mukhamedzyanov. High Temperature. 2004. Vol.42. No.2. P.282-289.

АДИАБАТИЧЕСКАЯ КАЛОРИМЕТРИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ ЖИДКОЙ ВОДЫ

*Воронов В.П., Поднек В.Э.**

ИПНГ РАН, Москва, Россия

**podnek77@gmail.com*

Методом адиабатического калориметра измерена изобарная (при давлении 0,1 МПа) теплоемкость глубоко переохлажденной воды, находящейся в запаянных стеклянных ампулах объемом 1 мл. Измерения проведены при температуре выше 244 К при нагревании из низкотемпературной области со скоростью 0,4 К/час. Наблюдаемое с понижением температуры аномальное нарастание изобарной теплоемкости переохлажденной воды аналогично установленному ранее тем же методом в работе Томбари и др. [1]. В предположение степенного роста сингулярной части теплоемкости переохлажденной воды с критическим показателем $3/2$, соответствующим начальному флуктуационному режиму Бразовского теории слабой кристаллизации Ландау, кажущаяся температура расходимости теплоемкости порядка 228,8 К. Последнее значение лежит чуть ниже температуры гомогенной нуклеации льда при атмосферном давлении и близко к температурам второй критической точки воды и линии Видома максимума теплоемкости переохлажденной воды при атмосферном давлении, предсказываемым в рамках гипотезы полиаморфизма жидкой воды [2]. Заметим, однако, что упомянутый выше критический показатель противоречит изинговскому классу универсальности предполагаемой второй критической точки воды, а следовательно, и самой идее ее существования. При измерениях мы столкнулись с резким нарастанием времен релаксации к равновесному состоянию в переохлажденной воде с понижением температуры, не позволившим нам провести адиабатические измерения теплоемкости при более низких температурах по причине спонтанного замерзания воды. Наши данные по изобарной теплоемкости объемной переохлажденной воды в исследованном интервале температур практически совпадают с данными Томбари и др. и лежат заметно выше данных Анжела и др. [3], полученных на образцах эмульсифицированной воды и до сих пор считающихся единственно верными.

1. Tombari E., Ferrari C., Salvetti G., Chem. Phys. Lett. **300**, 749 (1999)
2. Holten V., Bertrand C.E., Anisimov M.A., Sengers J.V., J. Chem. Phys. **136**, 094507 (2012)
3. Angell C.A., Oguni M., Sichina W.J., J. Phys. Chem. **86**, 998 (1982)

АНАЛИЗ ОТКЛОНЕНИЙ ДИМЕРИЗАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ ОТ ИДЕАЛЬНОСТИ В СМЕСЯХ С ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ В ФОРМЕ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ЯМЫ

Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.*

ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**A.Davydov@ihte.uran.ru*

Анализ химического равновесия в неидеальных ассоциированных жидкостях является достаточно сложной проблемой статистической термодинамики, поскольку взаимодействие ассоциатов и мономеров в плотной жидкости должно приводить к определенному сдвигу химического равновесия. Результат зависит от характера межмолекулярных сил, действующих между частицами в смеси.

Целью настоящей работы было проанализировать влияние короткодействующего притяжения на отклонения химического равновесия от идеальности в жидкой смеси мономеров и димеров.

Учет притяжения в димеризующейся смеси осуществляется в работе с помощью парного потенциала прямоугольной ямы. Причем самопроизвольная реакция димеризации протекает с изменением объема, в зависимости от степени слияния мономеров в димере.

Чтобы определить положение равновесия такой жидкой смеси, необходимо найти минимум свободной энергии Гиббса по двум независимым переменным: объему и концентрации димеров. При этом в уравнении закона действующих масс разумно воспользоваться средним коэффициентом активности, именно в котором (а не в константе равновесия) учесть все межмолекулярные взаимодействия.

В результате показано, что увеличение притяжения между мономерами приводит к смещению равновесия в сторону диссоциации, в то время как увеличение притяжения между димерами играет обратную роль. Учет притяжения приводит к увеличению коэффициента упаковки, особенно в случае большего притяжения между димерами и малых длинах связей. При этих условиях проявляется максимальная тенденция к упорядочению жидкости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-03-01588.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПЛОТНОЙ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ

*Исмагамбетова Т.Н.,*¹ Габдуллин М.Т.,^{1,2} Рамазанов Т.С.¹*

¹НИИЭТФ, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан, ²КБТУ, Алматы, Казахстан

*ismagambetova@physics.kz

В данной работе использовались потенциалы взаимодействия, учитывающие принцип запрета Паули [1, 2]. Принцип Паули запрещает двум электронам находиться одновременно в одном и том же состоянии, следовательно, учитывает разные направления спинов. Также было рассмотрено влияние, создаваемое разницей между температурами электронов и ионов [3]. Термодинамические свойства, включая уравнение состояния, были рассчитаны с использованием данных потенциалов и полученных на их основе радиальных функций распределения (РФР).

-
1. Ramazanov T.S., Moldabekov Zh.A. and Gabdullin M.T. // Phys. Rev. E 2015. V. 92. P. 023104.
 2. Moldabekov Zh.A., Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. // Contrib. Plasma Phys. 2012. V. 52. P. 207-210.
 3. Bredow R., Bornath Th., Kraeft W.-D., Redmer R. // Contrib. Plasma Phys. 2013. V. 53. P. 276-284.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ «НАФТАЛИН – СКФ РАСТВОРИТЕЛЬ»

Ахметзянов Т.Р., Хайрутдинов В.Ф., Габитов И.Р., Гумеров Ф.М.*

ФГБОУ ВО КНИТУ, Казань, Россия

*ahmetzyanov1992@bk.ru

Для моделирования, оптимизации и масштабирования процессов глубокой переработки углеводородного сырья с использованием СКФ сред, требуются надежные данные фазового поведения интересующих смесей под высоким давлением, в частности, растворимости низколетучих жидких и твердых компонентов в СКФ среде. Эти факты указывают на

потребность надежных данных по фазовому равновесию систем «СКФ среда–компоненты углеводородного сырья».

В данной работе в качестве компонента нефти выбран углеводород нафталин. Нафталин относится к ароматическим углеводородам. Содержание ароматических углеводородов в нефти изменяется от 10–15 до 30 % (масс.). Эти углеводороды составляют основу тяжелых нефтяных остатков. С этим связан выбор нафталина в качестве объекта исследований в данной работе.

Для исследования растворимости нафталина в СКФ средах создана экспериментальная установка, реализующая динамический метод. Для апробации установки проведены пробные эксперименты по исследованию растворимости нафталина в СКФ CO₂ [1, 2]. Была получена хорошая сходимостъ данных полученных в данной работе с литературными данными.

Проведены исследования растворимости нафталина в СКФ пропан-бутановой смеси, содержащей 75 % пропана и 25 % бутана [3], в диапазоне давлений 5 ÷ 20 МПа и в интервале температур 373 ÷ 423 К. Проведен анализ влияния на растворимость термодинамических параметров процесса.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-19-00478).

1. Амирханов Д.Г. Растворимость веществ в сверхкритических флюидных средах. /Амирханов Д.Г., Гумеров Ф.М., Сагдеев А.А., Галимова А.Т. // Изд. Отечество. Казань 2014. с. 264.
2. Mark McHugh and Michael E. Paulaiti . Solid Solubilities of Naphthalene and Biphenyl in Supercritical Carbon Dioxide. J. Chem. Eng. Data 1980, 25, 326-329.
3. Гумеров Ф.М., Фарахов М.И., Хайрутдинов В.Ф., Габитов Р.Ф., Зарипов З.И., Хабриев И.Ш., Ахметзянов Т.Р. Увеличение функциональности карбонатного щебня посредством сверхкритической флюидной импрегнации битуминозными соединениями // Сверхкритические флюиды: теория и практика. 2015. Т. 10. №2. С. 4-16.

РАСТВОРИМОСТЬ АНТРАЦЕНА В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА

*Хазипов М.Р.,*² Галимова А.Т.,¹ Гатин Р.С.,¹ Сагдеев А.А.¹*

¹НХТИ (филиал) ФГБОУ ВО КНИТУ, Нижнекамск, Россия, ²ФГБОУ ВО КНИТУ, Казань, Россия

*2351092@mail.ru

При изучении фазовых равновесий особое место занимает такое понятие, как растворимость веществ, в том числе, в сверхкритических флюидных средах. Знание о фазовых равновесиях в системах, находящихся в сверхкритическом флюидном состоянии, необходимы для понимания широких спектров процессов, составляющих основу инновационного технологического направления, именуемого «сверхкритическими флюидными технологиями» (СКФТ).

Одним из основных соединений, дезактивирующих катализатор, является антрацен. В данной работе исследована растворимость антрацена при изотермах 423 К, 435 К, 448 К в диапазоне давлений 9,6–22 МПа. Исследование растворимости осуществлялось на экспериментальной установке, защищенной патентом РФ на полезную модель [1].

Как показали результаты исследования с повышением температуры и давления растворимость антрацена увеличивается. Это обусловлено тем, что повышение температуры ведет к увеличению давления насыщенных паров растворяемого вещества, вследствие чего его концентрация в фазе растворителя увеличивается. Таким образом, увеличивается и растворимость.

Кроме того, проведено описание растворимости антрацена с использованием уравнения состояния Пенга–Робинсона и трех подгоночных параметров [2]. Погрешность описания результатов растворимости составила 7 %. Данные о растворимости дезактивирующих катализатор соединений в значительной степени определяют оптимальные с точки зрения энерго- и ресурсосбережения режимы процессов регенерации катализаторов.

1. Патент на полезную модель РФ No 163707 опубл. 10.08.2015
2. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ No 2016613119 опубл. 17.03.2016.

АНАЛИЗ МЕТОДОВ ПОСТРОЕНИЯ ЛИНИИ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ ДЛЯ РАЗНЫХ МОДЕЛЕЙ СРЕДНЕГО ДИАМЕТРА

Кудрявцева И.В., Рыков С.В., Рыков В.А.*

СПбГИТМО, Санкт-Петербург, Россия

**togg1@yandex.ru*

Мы провели анализ различных моделей линии фазового равновесия в диапазоне от тройной точки до критической точки. Для этого мы использовали систему взаимосогласованных уравнений. В эту систему входят: уравнение линии упругости $p = p_s(T)$ в форме, использованной в [1], уравнение для плотности насыщенной жидкости, сингулярная составляющая которой имеет следующий вид:

$$\rho^+(T) = \rho_c \left(1 + \sum_{n=1} D_n^* |\tau|^{n\beta} + D_2 |\tau|^{\beta+\Delta} + D_3 |\tau|^{1-\alpha} + \dots \right); \quad (1)$$

уравнение для плотности насыщенного пара ρ^- :

$$\rho^-(T) = T p'_s(T) (1 - \rho^-/\rho^+) [r(T)]^{-1} = T p'_s(T) [r^*(T)]^{-1}, \quad (2)$$

где $r^* = r/(1 - \rho^-/\rho^+)$ — «кажущаяся» теплота парообразования; сингулярная составляющая которой имеет следующий вид:

$$r^*(T) = \left(\frac{p_c}{\rho_c} \right) \left(d_0 + \sum_{n=1} d_n^* |\tau|^{n\beta} + d_2 |\tau|^{\beta+\Delta} + d_3 |\tau|^{1-\alpha} + \dots \right). \quad (3)$$

Здесь p_c — критическое давление; $\tau = t - 1$; $t = T/T_c$; T_c — критическая температура; α , β , Δ — критические индексы; ρ_c — критическая плотность; r — теплота парообразования.

На основе данной системы уравнений, $p = p_s(T)$ [1] и (1)–(3), выполнен анализ ряда моделей среднего диаметра. При этом мы использовали один и тот же массив данных о давлении p_s и плотности ρ^+ и ρ^- ряда веществ (аргона, гексафторида серы, ДЕЕ и др.). Результаты, полученные для разных моделей среднего диаметра, обсуждаются.

1. Kozlov A.D., Lysenkov V.F., Popov P.V., Rykov V.A. // J. Eng. Phys. Thermophys. 1992. V.62. P. 611.

СТАТИСТИКО-ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СОЛЕВЫХ РАСПЛАВАХ

*Пешкина К.Г., Ткачев Н.К.**

ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**N.Tkachev@ihte.uran.ru*

В докладе будут представлены результаты теоретических расчетов диссоциационных равновесий для анионных комплексов типа $(MX_4)_2^- = M_2^{2+} + 4X^-$ в галогенидных расплавах на основе MX_2 . Рассматривается упрощённая модель смеси заряженных твердых сфер различающихся диаметров, когда учитываются только электростатические взаимодействия и конечные размеры ионов, а вклад комплексов в термодинамику расплава дополнительно вносит его энергия образования. Такая модель является естественной отправной точкой для данной проблемы и проливает свет на механизм самопроизвольного (в термодинамическом смысле) возникновения заряженных комплексных группировок. Ядром задачи является система уравнений равновесия, содержащая и закон действующих масс, и уравнение состояния, которая позволяет самосогласованно рассчитать равновесную концентрацию комплексов и плотность расплава. На примере аппроксимации диаметра комплекса как утроенного диаметра простых ионов показывается, что это может приводить к существенному завышению эффектов изменения мольного объема при рассмотрении его температурной зависимости. Учет перекрытия атомов внутри комплекса позволяет описать более плавное изменение объема с температурой. Проведено обобщение развитой модели на случай бинарных расплавов галогенидов многовалентных металлов с галогенидами щелочных металлов. Приводятся примеры кривых концентрации комплексов от состава указанных бинарных расплавов, термодинамические характеристики. В заключении обсуждаются проблемы и перспективы описания реальных солевых расплавов, содержащие двух- и трех- валентные катионы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-03-00606).

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВА КАРБИДА БОРА (B_4C) В МЕГАБАРНОЙ ОБЛАСТИ ДАВЛЕНИЙ УДАРНОГО СЖАТИЯ

Молодец А.М.

ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

molodets@icp.ac.ru

Карбид бора (B_4C) сочетает ряд высоких служебных характеристик, что обуславливает его успешное использование в ряде важных приложений - броневых конструкциях, атомной энергетике и др.. Поэтому исследованию разнообразных свойств карбида бора в области высоких давлений и температур, в том числе в экстремальных условиях ударного сжатия, посвящена обширная научная литература (см. [1-3] и ссылки в них). В контексте предлагаемого доклада следует отметить, что учёт новых экспериментальных данных [1] для области 200-800 ГПа позволяет предположить существование ярко выраженного излома ударной адиабаты B_4C , обусловленного плавлением карбида бора при ударном сжатии в диапазоне $95 < P < 125$ ГПа. Эта гипотеза, её обоснование и развитие представлены в [2]. При этом построена свободная энергия карбида бора и его расплава в виде функции своих переменных в мегабарном диапазоне давлений ударного сжатия.

В представляемом докладе показано, что некоторые результаты [2] могут быть использованы в виде уравнения состояния Ми-Грюнайтзена, которое, как известно, широко применяется при математическом моделировании ударноволновых процессов и ряда теплофизических свойств ударносжатого материала. В докладе обсуждаются ключевые

компоненты уравнения Ми–Грюнайзена для расплава карбида бора—объёмные зависимости коэффициента Грюнайзена, а также потенциальные функции давления и энергии. Рассмотрены расчёты ударной адиабаты, температуры, теплоёмкости и скорости звука вдоль ударной адиабаты расплава карбида бора. Полученные результаты сопоставляются с последними публикациями других авторов [3], где также представлены количественные результаты по теплофизическим свойствам расплава карбида бора, полученные на основе первопринципных молекулярно-динамических расчётов.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Конденсированное вещество и плазма при высоких плотностях энергии».

1. Sterne P.A. et al. // Journ. Phys. Conf. Ser., 2016. V. 717. P. 012082.
2. Молодец А.М. и др. // ЖЭТФ. 2017. Т 151. вып. 3. С. 550.
3. Shamp A. et al., // Phys. Rev. B. 2017. V. 95. P. 184111.

МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ЕДИНОГО ФУНДАМЕНТАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ SF₆

Рыков С.В., Кудрявцева И.В., Рыков В.А.*

СПбГУИТМО, Санкт-Петербург, Россия

**togg1@yandex.ru*

Рассмотрен метод построения единого фундаментального уравнения состояния (ЕФУС), основанный на линейной модели Скофилда, гипотезе Бенедика и представлении масштабной гипотезы критической точки в следующем виде [1]:

$$\Delta S \cdot X^{\frac{1-\alpha}{\chi}} = \varphi_0 + \varphi_1 \cdot m^2, \quad m = \Delta\rho \cdot X^{\frac{\beta}{\chi}}, \quad (1)$$

где $\Delta S = (\rho_c T_c / p_c) [S(\rho, T) - S_0(\rho, T)] / \phi(\omega)$; S — энтропия; $\phi(\omega)$ — кроссоверная функция; $\Delta\rho = \omega - 1$; $\omega = \rho / \rho_c$; α , β , χ и Δ — критические индексы; X — термодинамическая функция, имеющая особенность в критической точке, которая характеризуется критическим индексом χ (например, если $X = K_T$, то $\chi = \gamma$).

На основе системы уравнений (1) рассчитана структура фундаментального уравнения SF₆ и масштабная функция свободной энергии Гельмгольца:

$$a(x) = A \left[(x + x_1)^{2-\alpha} - \frac{x_1}{x_2} (x + x_2)^{2-\alpha} \right] + B(x + x_3)^\gamma + C. \quad (2)$$

Единое фундаментальное уравнение состояния с масштабной функцией (2) апробировано на примере описания термодинамической поверхности гексафторида серы. Проведен анализ полученных результатов. Рассчитаны таблицы равновесных свойств SF₆ в области параметров состояния: по температуре от 223.555 К до 625 К и по давлению до 150 МПа. Также рассчитаны подробные термодинамические таблицы для широкой окрестности критической точки. Показано, что по точности расчета равновесных свойств в регулярной части термодинамической поверхности предложенное уравнение R1234uf не уступает фундаментальным уравнениям состояния [2, 3].

1. Rykov V.A., Rykov S.V., Kudryavtseva I.V., Sverdlov A.V. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 891. P. 012334.
2. Scalabrin G., Bettio L., Marchi P., Stringari P. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2007. V. 36. P. 617.
3. Guder C., Wagner W. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2009. V. 38. P. 33.

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА РАВНОВЕСИЯ ЖИДКОСТЬ-ПАР В БИНАРНЫХ СМЕСЯХ, СОДЕРЖАЩИХ МЕТАН

Вассерман А.А., Галкин В.Н.*

ОНМУ, Одесса, Украина

**avas@paco.net*

Некоторые авторы исследовали экспериментально фазовое равновесие жидкость-пар в бинарных смесях, содержащих метан, но не описали аналитически полученные данные. Поэтому нами выполнено аналитическое описание экспериментальных данных о фазовом равновесии в бинарных смесях гелий-метан, аргон-метан и диоксид углерода-метан. Составленные уравнения представляют давление жидкости либо пара как функцию температуры и состава и содержат от 4 до 6 коэффициентов.

При составлении уравнений использована программа, предусматривающая оптимизацию числа коэффициентов уравнений без существенного снижения точности аппроксимации экспериментальных данных. Программа обеспечивает выбор наиболее значимых коэффициентов из банка, содержащего 30 коэффициентов.

Для смеси гелий-метан использованы 305 опытных значений давления жидкости и пара из 4-х источников в интервалах температуры 93...191 К и давления 0,48...26,22 МПа. Для смеси аргон-метан использованы 168 значений давления жидкости и пара из 4-х источников в интервалах температуры 90...126 К и давления 0,016...3,87 МПа. Для смеси диоксид углерода-метан использованы 184 значения давления из 4-х источников в интервалах температуры 219...293 К и давления 0,58...8,52 МПа. Для жидкости и пара получено почти одинаковое количество данных.

Средние квадратические отклонения опытных значений давления от рассчитанных составляют от 1,8 до 5,3%. Наибольшее отклонение наблюдается у смеси гелий-метан в связи с резким ростом давления на изотермах в зависимости от состава. Построенные гистограммы отклонений показывают, что распределение отклонений близко к нормальному.

Уравнения позволяют определить состав либо температуру фаз при заданных значениях остальных параметров фазового равновесия. Расчёты состава и температуры сосуществующих фаз показали вполне удовлетворительное согласование расчётных значений с экспериментальными данными.

ИЗОХОРНАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ЛИНИИ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ Н-ГЕКСАН+ВОДА В ИНТЕРВАЛЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ 0-0.2566 М.Д. Н₂О

Безгомонова Е.И., Саидов С.М.*

ИФ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

**bezgomonova_lena@mail.ru*

На высокотемпературном адиабатическом калориметре Х.И. Амирханова [1] были проведены экспериментальные исследования C_v , V , T свойств системы н-гексан+вода для различных составов (x): 0,1195; 0,1662; 0,1998; 0,2566 мольных долей Н₂О в интервале температур 312 – 503 К и давлений до 6 МПа.

Для исследований использовался адиабатический калориметр объемом 432,611 см³ при температуре $T = 298,15$ К и атмосферном давлении 0,1 МПа.

Для каждой измеренной изохоры были обнаружены два скачка изохорной теплоемкости. Резкий скачок теплоемкости при пересечении границ трех и двухфазных областей связан с фазовыми переходами жидкость-жидкость-газ в жидкость-газ, происходящими в

бинарной смеси н-гексан + вода, фазовый переход, связанный с растворением компонентов (жидкость-жидкость), более плавный и происходит в некотором интервале температур.

По данным измерений теплоемкости C_v , построены кривые фазового равновесия жидкость-жидкость-газ, жидкость-жидкость и жидкость-газ в зависимости от плотности и состава. Форма кривой фазового равновесия жидкость (менее летучий компонент)-газ (более летучий компонент) для состава 0,2566 мольных долей H_2O имеет параболическую форму и отличается от всех составов. Для этой концентрации кривые фазового равновесия жидкость-жидкость и жидкость-газ пересекаются в одной точке — критической точке трехфазного равновесия или верхней конечной критической точке (ВККТ).

Используя экспериментальные данные на критической линии для смеси и данные давления пара чистого растворителя (н-гексана) был рассчитан параметр Кричевского. На основе параметра Кричевского были также рассчитаны термодинамические и структурные свойства разбавленной смеси н-гексан + вода вблизи критической точки н-гексана.

1. Амирханов Х.И., Алибеков Б.Г., Вихров Д.И., Мирская В.А. Изохорная теплоемкость и другие calorические свойства углеводородов метанового ряда. Махачкала: Дагкнигоиздат, 1981.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СОЛЕВЫХ РАСПЛАВОВ ПРИ УЧЕТЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ

Давыдов А.Г., Ткачев Н.К.*

ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**A.Davydov@ihte.uran.ru*

Изучение термодинамических характеристик и фазовых равновесий в различных системах является важнейшей частью большинства исследований, связанных с материаловедением, поскольку при рассмотрении тех или иных свойств материала в первую очередь необходимо обладать информацией о границах устойчивости каждой фазы в системе. Существуют различные теоретические подходы к решению этой проблемы, основанные на методах *ab initio*, молекулярного моделирования, термодинамического моделирования и их комбинации, в то время как статистико-термодинамическая теория применительно к этим задачам менее разработана.

Одним из направлений в этой области является исследование термодинамических свойств и межфазных границ в солевых расплавах. Поэтому теоретическое описание различных эффектов, наблюдаемых в этих системах, является важной задачей. Данное исследование связано с изучением влияния поляризационных эффектов между ионами на термодинамические свойства и процесс плавления галогенидных расплавов щелочных металлов. Трудность здесь заключается в том, что поляризационные эффекты всегда возникают не только между соседними частицами, а также в последующих координационных сферах. Поэтому для рассмотрения поляризационных эффектов необходимо вводить диэлектрическую постоянную.

В сообщении будет представлена статистико-термодинамическая модель учета поляризационного вклада в парный потенциал взаимодействия ионов солевого расплава. Такая модель реализована при помощи термодинамической теории возмущений, где эталонной системой является потенциал заряженных твердых сфер. Таким образом, более слабый эффект поляризации ионов может рассматриваться как возмущение.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01234.

ВЯЗКОСТЬ ЖИДКИХ СПЛАВОВ КОБАЛЬТА С КРЕМНИЕМ И БОРОМ

Олянина Н.В., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И.*

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

**albeltyukov@mail.ru*

В настоящей работе проведены исследования температурных (политерма) и концентрационных (изотерма) зависимостей кинематической вязкости расплавов систем Co-Si, Co-B и Co-Si-B.

Исследования вязкости проводили методом крутильных колебаний на автоматизированной установке [1] в защитной атмосфере гелия в тиглях из Al_2O_3 при наличии двух торцевых поверхностей трения [2].

Политермы вязкости расплавов систем Co-Si и Co-B (до 54 ат.% металлоида), а также расплавов систем $Co_{89}B_xSi_{11-x}$, $Co_{81}B_xSi_{19-x}$ и $Co_{75}B_xSi_{25-x}$ имеют монотонный характер и хорошо описываются уравнением Аррениуса. Это указывает на отсутствие резких изменений структуры расплавов при их нагреве.

Изотермы вязкости расплавов Co-Si имеют куполообразный вид с максимальными значениями в интервале 30-40 ат.% кремния. Вязкость расплавов системы Co-B при содержании бора до 15 ат.% и в интервале от 36 до 50 ат.% практически не зависит от концентрации. В интервале концентраций от 20 до 36 ат.% бора наблюдается интенсивный рост значений вязкости расплава. Немонотонный характер изотерм вязкости свидетельствует об изменении типа ближнего упорядочения в расплаве при изменении состава.

Изотермы вязкости квазибинарных систем Co-Si-B имеют монотонный характер. Замена атомов кремния атомами бора в этих системах практически не оказывает влияния на значения вязкости расплавов.

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (№ гос. регистрации темы АААА-А17-117022250039-4)

1. Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И. // Приборы и техника эксперимента. 2008. No. 2. С. 155.
2. Олянина Н.В., Бельтюков А.Л., Гончаров О.Ю., Ладьянов В.И. // Расплавы. 2012. No. 2. С. 83.

**ВЯЗКОСТЬ УКСУСНОЙ И МАСЛЯНОЙ КИСЛОТ, А ТАКЖЕ ИХ
ВОДНЫХ РАСТВОРОВ**

Габитов И.Р., Зарипов З.И.*

ФГБОУ ВО "КНИТУ Казань, Россия

**gabitov.ilgiz@gmail.com*

Проблема утилизации отходов производства приобретает всё большую актуальность. Так, по данным Минприроды РФ [1] за 2016 год, на территории России накоплено около полумиллиарда тонн отходов, относящихся к I-IV классам опасности. Причём количество это продолжает ежегодно увеличиваться. В связи с этим по-прежнему актуальной является задача разработки и внедрения новых прогрессивных способов утилизации, способных решить существующие проблемы. Одним из таких способов может стать процесс сверхкритического водного окисления СКВО [2], обладающий высокой эффективностью, высокой оперативностью, экологической безопасностью, и при этом остающийся экономически рентабельным.

Исследованию процесса СКВО посвящено большое количество работ, в том числе выполненные на кафедре теоретических основ теплотехники ФГБОУ ВО "КНИТУ" [3, 4], где настоящий этап исследования подразумевает построение математической модели процесса водного окисления с целью масштабирования его до промышленных размеров. Важнейшим условием получения такой модели является наличие достоверных данных по теплофизическим свойствам термодинамических систем, участвующих в моделируемом процессе.

Настоящий доклад посвящён исследованию вязкости уксусной и масляной кислот, а также их водных растворов в диапазоне температур 298.15 - 473.15 К при давлениях до 30 МПа. Экспериментальные значения динамических коэффициентов вязкости получены на апробированной экспериментальной установке [5]. Полученные зависимости свойств термодинамических систем от параметров состояния описаны математическими моделями с применением уравнений Arrhenius-Andrade и Redlich-Kister.

1. Доклад Минприроды России // М.: НИА-Природа. 2017. 760 с.;
2. Галкин А.А., Лунин В.В. // Успехи Химии. 2005. Т. 74. № 1, 24-40;
3. Захаров А. А., Усманов Р. А. // Вестник Казанского технолог. ун-та. 2012. Т. 15. № 11, 194-196;
4. Аетов А.У., Гумеров Ф.М. и др. // Бутлеровские сообщения. 2017. Т. 50. № 4, 67-75;
5. Шамсетдинов Ф.Н., Габитов И.Р., Зарипов З.И., и др. // Вестник Казанского технолог. ун-та. 2013. Т. 16. № 18, 112-114.

РАСЧЕТ СДВИГОВОЙ ВЯЗКОСТИ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кондратьюк Н.Д., Писарев В.В.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**kondratyuk@phystech.edu*

Современная индустрия проявляет большой интерес к исследованию свойств жидких углеводородов, так как они входят в состав смазочных, изоляционных и топливных смесей. Одними из определяющих характеристик являются транспортные коэффициенты (диффузия, вязкость и теплопроводность).

Проведенные расчеты вязкости жидких углеводородов продемонстрировали возможность применимости метода Грина-Кубо [1] в случае однокомпонентных систем. Полученные значения коэффициентов вязкости для исследуемых углеводородов совпадают с экспериментальными данными в пределах 10 %. Экспериментальная зависимость вязкости от температуры воспроизводится с помощью используемых методов.

Проведен анализ вкладов различных компонент тензора напряжений в интеграл вязкости. Предложен подход для удобного представления данных в виде таблиц. Показано, что вклады отдельных компонент могут на порядок превосходить итоговое значение интеграла. Также получено, что времена корреляции растут с увеличением количества атомов в молекуле углеводорода.

Выполнено сравнение результатов, полученных методом Грина-Кубо, с результатами из неравновесной молекулярной динамики [2]. Значения совпадают в пределах вычислительной погрешности для всего ряда исследуемых n-алканов при различных температурах и давлениях.

В работе выполнено сравнение трех потенциалов взаимодействия: TraPPE-EN, OPLS-AA и COMPASS, который в отличие от TraPPE-EN и OPLS-AA учитывает ангармонизм связей и углов. В случае вязкости, все три потенциала дают схожие результаты.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 17-79-20391.

1. Zhang Y., Otani A., Maginn E. J. // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. No. 8. P. 3537.
2. Bordat P., Müller-Plathe F. // J. Chem. Phys. 2002. V. 116. No. 8. P. 3362.

ТЕПЛОВОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ПЕРЕГРЕТЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Поволоцкий И.И., Волосников Д.В., Скрипов П.В.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**iliyapov@rambler.ru*

Доклад направлен на экспериментальную проверку гипотезы Л. П. Филиппова о взаимосвязи величины дополнительного теплового сопротивления растворов (относительно аддитивного закона) с величиной их объема смешения. Ранее факт такой взаимосвязи был подтвержден для растворов с положительным объемом смешения. В этом исследовании рассмотрены растворы с отрицательным объемом смешения.

Методика состоит в регистрации параметров отклика на импульсное тепловыделение при заданных параметрах функции нагрева и последующее их сопоставление с аддитивными значениями. Источником тепла и чувствительным элементом служит проволочный зонд – термометр сопротивления. По измеряемым в опыте первичным данным вычисляются значения среднemasсовой температуры зонда $T(t)$, мощности его нагрева $P(t)$, плотности теплового потока через его поверхность $q(t)$ и теплового сопротивления вещества $R_{\lambda}(t) = \Delta T(t)/q$ при заданном режиме нагрева для любого момента времени t .

По представленной методике были проведены опыты с чистыми веществами и растворами вода-гликоли (этиленгликоль, диэтиленгликоль, триэтиленгликоль) при атмосферном давлении и температурах 90°C, 120°C, 150°C. Последние две температуры находятся в области перегретых состояний растворов с существенным содержанием воды.

Обнаружено, что характеристики теплопереноса растворов с отрицательным объемом смешения имеют отрицательные отклонения от аддитивных значений. Данное обстоятельство свидетельствует о существовании дополнительного теплового сопротивления в растворах данного типа. Также обнаружена качественная корреляция между величиной дополнительного теплового сопротивления и величиной объема смешения растворов.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ ИЗЛУЧЕНИЯ ВЫСОКО ОРИЕНТИРОВАННОГО ПИРОЛИТИЧЕСКОГО ГРАФИТА

Сенченко В.Н., Беликов Р.С.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**pyrolab@ihed.ras.ru*

В настоящее время данные по терморadiационным свойствам пиролитического графита при высоких температурах представляют несомненный интерес. Причиной этого является как невозможность проведения стационарных экспериментальных исследований при температурах выше 3300 К, так и особенности исследуемого материала.

В ходе экспериментов по импульсному миллисекундному электрическому нагреву были получены спектры излучения пирографита при температурах, близких к температуре плавления, в диапазоне длин волн 0,25-0,8 мкм. В качестве исследуемого материала выступал НОРГ графит, исследования проводились при статическом газовом давлении около 1 кбар. Полученные спектры термического излучения нагретых образцов позволяют получить значения терморadiационных свойств поверхностей, параллельной и перпендикуляр-

ной базисной плоскости пирографита, таких как спектральная излучательная способность при данных температурах.

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ КОЭФФИЦИЕНТНОЙ ЗАДАЧИ ПО ПОИСКУ ОТРАЖАТЕЛЬНО-ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТОДОМ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ТИХОНОВА

Борщев Н.О., Антонов В.А., Белявский А.Е.*

МАИ, Москва, Россия

**www.moriarty93@mail.ru*

При проведении теплофизического эксперимента трудно определить различные характеристики материала в любой точке пространства, необходимо устанавливать огромное количество термопар, точно знать погрешность измеряемого оборудования, метода моделирования температурного поля и т.д. Целью данной работы является создание устойчивого алгоритма определения излучательно-отражательных характеристик в рассматриваемой области с использованием регуляризирующего алгоритма Тихонова [1].

Первым этапом исследования является определение теоретического поля методом конечных элементов, где шаг по пространству выбирается таким образом, чтобы экспериментальные и теоретические значения температур находились в одних узлах.

Вторым этапом является задание базисных функций от времени и координаты, таким образом позволив проводить расчет относительно некоторой постоянной величины потока.

Третьим этапом является составление функционала невязки между теоретическими и расчетными значениями температур. Минимум функционала приравнивается к нулевому вектору и система линейных алгебраических уравнений, откуда находятся постоянные величины эффективных потоков на границе, при домножении на соответствующие базисные функции находятся искомые тепловые потоки.

Четвертым этапом является определение эффективной степени черноты [2] и диффузной отражательной способности материала, решая классическое уравнение Стефана-Больцмана для серого тела.

Таким образом, построены зависимости температурного нестационарного поля от степени черноты и коэффициента диффузного отражения материала при диффузном высокоинтенсивном лучистом нагреве, коэффициентов чувствительности от характеристик пространства.

-
1. Тихонов А.Н., Гончаровский А.В. Численные методы решения некорректных задач. Изд. М. 2012.
 2. А.Г. Блох, Ю.А. Журавлев, Л.Н. Рыжов. Теплообмен излучением. Изд. М.: Энергоатомиздат. 1991.

КОРРЕЛЯЦИЯ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ И ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА Ti_3Al

Мурлиева Ж.Х.,^{*1,2} Палчаев Д.К.,¹ Исхаков М.Э.,¹ Рабаданов М.Х.¹

¹ДГУ, Махачкала, Россия, ²ДГУНХ, Махачкала, Россия

*zhariyat@mail.ru

В работе исследовано аномальное поведение электросопротивления интерметаллида Ti_3Al , которое заключается в том, что его температурный коэффициент сопротивления (ТКС) носит полупроводниковый характер. Такое поведение ТКС для проводников связывается с высоким статическим беспорядком. Для установления природы особенностей свойств этого интерметаллида нами исследованы температурные зависимости электросопротивления и коэффициента теплового расширения (КТР). Образец получен индукционной плавкой чистых титана и алюминия, охлаждение проводилось в той же печи после ее выключения. Прецизионные измерения электросопротивления четырех образцов зондовым методом проводились с коммутацией тока от комнатных температур до 1000 °С. Одновременно на том же образце, при тех же условиях измерялось его тепловое расширение методом кварцевого дилатометра.

Нами проведены четыре цикла нагрева и охлаждения образца. В первом нагреве на температурной зависимости сопротивления наблюдается гистерезис, который существенно снижался в последующих циклах. Исчезновение эффекта гистерезиса свидетельствует о достижении системой стабилизированного состояния. На температурных зависимостях, как КТР, так и электросопротивления, проявляются особенности, причем на последних наиболее отчетливо. Это связано с конкуренцией и доминированием металлического и полупроводникового характеров проводимости на каждом из температурных интервалов.

Установлено, что аномалии на температурных зависимостях сопротивления и КТР коррелируют, причем эта корреляция прямая, как и для традиционных металлов. Это свидетельствует об определяющей роли изменения межатомного расстояния, связанного с ангармонизмом колебаний атомов решетки, не только при формировании потенциала рассеяния элементарных зарядовых возбуждений, но и при формировании самих зарядовых возбуждений. Локальные разупорядочения атомов в элементарной ячейке Ti_3Al при соответствующей термообработке предоставляют возможность управления абсолютными значениями электросопротивления этого интерметаллида и его температурным коэффициентом.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ № 3.5982.2017/8.9.

УДЕЛЬНАЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ САПФИРА ПРИ УДАРНОМ СЖАТИИ ДО 750 ГПа

Николаев Д. Н.,* Терновой В. Я., Шутов А.В., Остриж А. В.

ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

*nik@icp.ac.ru

Сапфир широко применяется как изолятор при изучении электропроводности веществ при многократном ударном сжатии. Однако, прямые измерения электрического сопротивления сапфира при ударном сжатии были выполнены в работе [1] только до давления 220 ГПа, а экстраполяция данных давала металлический уровень проводимости при давлении выше 270 ГПа.

В докладе будут представлены данные измерений удельной электропроводности монокристаллического сапфира М ориентации при ударном сжатии до давления 750 ГПа.

Для ударного нагружения измерительной ячейки использовались маховские кумулятивные генераторы ударного сжатия, аналогичные [2], в одноступенчатой и двухступенчатой конфигурациях. Для измерения электрического сопротивления ячейки использовалась трехэлектродная схема. Скорость ударной волны в сапфире и яркостная температура измерялись при помощи многоканального оптического пирометра и скоростных оптических детекторов. Так же измерялась отражательная способность фронта ударной волны на длине волны 810 нм.

Полученные данные сравнивались с данными расчетов [3]. При давлении 550 ГПа измеренная удельная электропроводность сапфира не превышала 60 См/см, что дает возможность использовать его как изоляционный материал при измерении электрических свойств сжатого водорода.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 18-08-00964 А с использованием оборудования Московского регионального взрывного центра коллективного пользования РАН (ЦКПВ).

1. Weir S.T., Mitchell A.C., Nellis W.J. // J. Appl. Phys. 1996. V. 80. No. 3. P. 1522 - 1525.
2. Nikolaev D., Ternovoi V., Kim V., Shutov A. // Journal of Physics: Conference Series. 2014. V. 500. No. 14. P. 1-5.
3. H. Liu, J.S.Tse, W.J.Nellis. // Scientific Reports. 2015. V. 5. P. 12823.

ПРИРОДА ФОРМИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ПРОВОДНИКАХ

Палчаев Д.К.

ДагГУ, Махачкала, Россия

dairpalchaev@mail.ru

Современная теория электросопротивления проводников претерпевает кризис в решении таких вопросов как: количественное описание температурной зависимости фононного электросопротивления даже для чистых, нормальных металлов; количественное описание температурных зависимостей электросопротивления при магнитном и атомном упорядочениях и разупорядочениях; природа проводимости высокотемпературных сверхпроводников, у которых отсутствуют свободные и нелокализованные носители заряда; интерпретация отрицательного температурного коэффициента электросопротивления для проводников с высоким статическим беспорядком. Более того, существует противоречие, связанное с прямой и обратной зависимостью проводимости материалов от времен релаксации в выражениях Блоха и Максвелла соответственно. Причем, в том и другом случае подразумевается релаксация системы к исходному состоянию в результате ее линейной реакции на отклонение от зарядовой однородности при установлении градиента электрического потенциала, удовлетворяющей закону Ома.

Разработка природоподобных технологий получения материалов и изделий из них требует фундаментальных знаний, в том числе по проводимости и ее связи со структурой и другими свойствами этих материалов, основанных на надежных эмпирических данных. Достоверным источником данных по температурной зависимости свойств материалов до сих пор являются экспериментальные результаты.

На основе экспериментальных данных по температурным зависимостям электросопротивления и теплового расширения, полученных (*in situ*) для металлов и сплавов, обнаружена связь, близкая к функциональной, между электросопротивлением и произведением коэффициента теплового расширения на температуру. Указанная связь не противоречит

признанным положениям теории проводимости и эмпирически обоснована. Она свидетельствует об определяющей роли термической деформации решетки атомов в формировании температурной зависимости электросопротивления проводников. Наличие такой связи позволяет установить природу проводимости материалов из первых принципов первого уровня.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГЗ № 3.5982.2017/8.9

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ И ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ. ДИФФУЗИЯ

Богатырев А. Ф.,*¹ Кучеренко М. А.,¹ Макеенкова О. А.²

¹МЭИ, Москва, Россия, ²СмоЛГУ, Смоленск, Россия

**tfs209@yandex.ru*

Смеси разреженных газов широко распространены в природе и являются рабочей средой во многих технологических процессах. Для расчета и обобщения транспортных свойств разреженных газов и их смесей обычно используются методы кинетических теорий и полуэмпирические методы на их основе [1]. Эти методы позволяют вычислить значения коэффициентов вязкости в достаточно широком интервале температур в пределах погрешности экспериментальных данных.

Расчет коэффициентов взаимной диффузии (КВД) тем или иным способом дает отклонение 3–10%, с тенденцией к росту в областях высоких и низких температур. В работе [2] нами предложен метод расчета КВД в умеренно-плотных газах при различных температурах. Погрешность расчета по данной методике существенно зависит от значений КВД разреженных газов.

В работе [3] нами предложена методика вычисления коэффициентов вязкости и диффузии в бинарных смесях газов на основе вязкости чистых газов. Мы провели расчет коэффициентов вязкости и взаимной диффузии для трех пар газов и получили совпадение с экспериментальными значениями в пределах ошибки эксперимента.

В данной работе приведены результаты применения указанного метода расчета КВД для 4 систем газов: H_2-N_2 , H_2-CO_2 , H_2-Ar , CO_2-Ar . Для большинства из них имеются экспериментальные данные в широком диапазоне температур и методики расчета КВД, предложенные различными авторами. Как показали наши вычисления, предлагаемый нами метод расчета КВД на основе вязкости чистых газов, является более простым и надежным и не требует большого объема вычислений для большинства природных газов.

-
1. Fokin L. R., Kalashnikov A. N. Transport properties of a rarefied CH_4-N_2 gas mixture // J Eng Phys Thermophy, 2016. Vol. 89. No. 1. Pp. 249–259.
 2. Bogatyrev A. F., Belalov V. R., Nezovitina M. A. Thermal diffusion in binary mixtures of moderately dense gases // J Eng Phys Thermophy, 2013. Vol. 86. No. 5. Pp. 1225–1231.
 3. Bogatyrev A. F., Makeenkova O. A., Belalov V. R., Kucherenko M. A. Calculation of viscosity and diffusion coefficients in binary mixtures of dilute gases // Advanced Studies in Theoretical Physics, 2017. Vol. 11. No. 6. Pp. 283–296.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МАСЕЛ

Галкин Д.А., Поволоцкий И.И., Скрипов П.В.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**dmitry.gal10@gmail.com*

Для надежной работы оборудования, вовлеченного в процессы переноса тепла, разрабатываются специальные технологические среды – смазочно-охлаждающие и закалочные жидкости, теплоносители, связующие и т.п. Существует проблема обоснованного выбора подобных сред, в первую очередь, в термически напряженных процессах. Основой решения проблемы служит знание теплофизических свойств вещества в условиях значительного и быстрого изменения температуры. Применительно к жидким средам такие данные могут быть получены преимущественно опытным путем.

В докладе будут представлены результаты по измерению теплопроводности ряда моторных масел на уникальной установке [1], [2], реализующей метод нестационарного нагрева нити (в англоязычной литературе – THW-метод). Основное внимание уделено согласованию условий опыта с требованиями модели, применяемой для расчета теплопроводности из первичных данных опыта.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-38-00206 и комплексной программы Президиума УрО РАН, проект 18-2-2-3.

1. Rutin S.B., Galkin D.A., Skripov P.V. // Int. J. Heat Mass Transfer. 2017. V. 115, P. 769-773
2. Rutin S.B., Galkin D.A., Skripov P.V. // Applied Thermal Engineering. 2018. V. 129, P. 145-147

ТЕПЛОВАЯ ПРОВОДИМОСТЬ РАСТВОРОВ: ПЕРЕГРЕТЫЕ И НЕУСТОЙЧИВЫЕ СОСТОЯНИЯ

Скрипов П.В.

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

pavel-skripov@bk.ru

Явление перегрева привлекает внимание исследователей в связи с существенной протяженностью области перегретых состояний на фазовой диаграмме вещества. Его ключевые особенности нашли применение в быстродействующих технических приложениях. При этом на систему накладываются жесткие ограничения по величине объема перегретого вещества и продолжительности наблюдения перегретого состояния.

Доклад посвящен изучению тепловой проводимости растворов при мощном тепловыделении. Объектами изучения служили растворы, импульсно перегреваемые относительно температуры равновесия жидкость-пар при заданном давлении и/или жидкость-жидкость. Отдельная серия опытов поставлена при перегреве относительно диффузионной спинодали раствора. Специфика исследования обусловлена разнообразием типов фазовых диаграмм, а также возможностью концентрационного пересыщения раствора. Выяснение влияния фактора двойной метастабильности (и неустойчивости), обладающего собственными характерными временами, на процессы теплопереноса и спонтанного вскипания растворов с различной степенью совместимости компонентов является приоритетной задачей исследования. Диапазон длительностей греющего импульса выбирался исходя из компромисса между достижением достаточной толщины прогретого слоя и гарантированным отсутствием макроскопического расслаивания и/или конвекции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-08-00381.

ВЛИЯНИЕ БЫСТРЫХ РАДИАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ НА ОХЛАЖДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МИШЕНИ ПОСЛЕ ОБЛУЧЕНИЯ МОЩНЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ

*Прима А.И.,*¹ Ding L.,² Zhang Q.,² Zhang Z.C.²*

¹ТПУ, Томск, Россия, ²DUT, Далянь, Китай

**artyom.prima@yandex.kz*

Представлены результаты экспериментального исследования и моделирования охлаждения мишени после облучения мощным ионным пучком с плотностью энергии 1–10 Дж/см². Исследования выполнены на ускорителе темп-6 (200–250 кВ, длительность 120 нс). Выполнены исследования на мишенях толщиной 75–200 мкм из нержавеющей стали, титана, латуни, меди и вольфрама. Представлена оригинальная методика оценки вклада теплопроводности мишени в охлаждение ее нагретой области. Получено, что радиационные дефекты, формируемые в мишени, оказывают значительное влияние на динамику охлаждения мишени, которая зависит от соотношения размеров мишени и ионного пучка. Охлаждение маленькой мишени (размер мишени меньше поперечных размеров ионного пучка) удовлетворительно описывается двумя процессами – уносом тепловой энергии из мишени за счет теплового излучения и выделением энергии при быстром термическом отжиге радиационно-индуцированных дефектов. Охлаждение нагретой области большой мишени, размеры которой значительно превышают поперечные размеры МИП, происходит быстрее, чем должно быть при охлаждении за счет теплового излучения и теплопроводности. Показано, что это может быть обусловлено подавлением отжига радиационных дефектов из-за миграции межузельных атомов из области облучения.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант № 17-79-10140.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ КОЛЕБАНИЙ

Лепешкин А.Р.

ЦИАМ, Москва, Россия

lepeshkin.ar@gmail.com

Исследование теплопроводности материалов в поле действия ультразвуковых волн является новой и сложной проблемой, решение которой имеет актуальное значение для ультразвукового оборудования, работающего при повышенных температурах в различных технологических процессах, используемых в энергетике и промышленности. К числу технологических процессов, интенсифицируемых ультразвуковыми колебаниями в газовой среде, относят процессы горения, газификации твердых топлив, процессы массообмена и коагуляции аэрозолей, очистки топочных газов и др. В данной работе предложена методика нестационарного исследования теплопроводности материалов в поле ультразвуковых волн на частоте 20 кГц. Разработано устройство для определения указанных характеристик, которое представляет собой конструкцию с ультразвуковым преобразователем и волноводом в форме стержня. Для исследования нестационарного теплового состояния конусного стержня и бесконтактных измерений температур его поверхности использовался термограф. Проводились исследования кривых нагрева кончика конусного стержня и времени передачи тепла от электронагревателя к кончику стержня в экспериментах с включенным ультразвуковым преобразователем и без него. По результатам исследований было получено, что теплопроводность металлического стержня из углеродистой стали увеличивается в 1.5 раза.

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ КОЭФФИЦИЕНТНОЙ ЗАДАЧИ ПО ПОИСКУ ТЕНЗОРА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ГРАДИЕНТНЫМ МЕТОДОМ СОПРЯЖЕННЫХ НАПРАВЛЕНИЙ

Борщев Н.О., Антонов В.А., Белявский Е.А.*

МАИ, Москва, Россия

**www.moriarty93@mail.ru*

При проведении теплофизического эксперимента зачастую бывает трудно определить различные характеристики материала в любой точке пространства, необходимо устанавливать огромное количество термопар, точно знать погрешность измеряемого оборудования, метода и т.д.

Целью данной работы является создание устойчивого алгоритма определения тензора теплопроводности в рассматриваемой области с использованием метода сопряженных градиентов при минимизации среднеквадратичного функционала невязки разницы теоретических и экспериментальных значений температур с учетом погрешности измерений.

Данный метод первого порядка точности позволяет с высокой точностью при минимальной априорной исходной информации определить искомые параметры объекта при минимальном числе итераций.

Первым этапом исследования является определение теоретического поля рассматриваемой области с учетом анизотропии [1] методом конечных элементов, где шаг по пространству выбирается таким образом, чтобы экспериментальные и теоретические значения температур находились в одних узлах.

Вторым этапом является составление среднеквадратичного функционала невязки или среднеквадратичной ошибки, который минимизируется в соответствии с методом, а также выбор вида соответствующих базисных функций коэффициентов теплопроводности, зависящих от температуры.

Третьим этапом является итерационный поиск искомых постоянных характеристик, методом сопряженных градиентов, предварительно выбрав шаг спуска и рассчитав его направление [2]. Домножив постоянные значения тензора на их соответствующие базисные функции, получим искомые их значения.

Таким образом, построены зависимости температурного нестационарного поля параметров тензора теплопроводности при диффузном высокоинтенсивном лучистом нагреве, коэффициентов чувствительности от характеристик пространства, а также зависимости параметров тензора от числа итераций.

-
1. В.Ф.Формалев. Теплоперенос в анизотропных твердых телах. М. Физматлит. 2015.
 2. Ф.В.Васильев. Методы оптимизации. М. Физматлит. 2011.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ЗЕОТРОПОВ ДИОКСИДА УГЛЕРОДА С ГИДРОФТОРОЛЕФИНАМИ R1234yf И R1234ze(Z) В СОСТОЯНИИ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА

*Лаптев Ю.А.,*¹ Цветков О.Б.,¹ Пятаков Г.Л.,¹ Зайнуллина Э.Р.²*

¹СПбГУИТМО, Санкт-Петербург, Россия, ²СПбГПУ, Санкт-Петербург, Россия

**laptev_yua@mail.ru*

Фторхлоруглероды (ХФУ) и гидрохлорфторуглероды (ГХФУ) разрушают озоновый слой. Гидрофторуглероды имеют высокий потенциал глобального потепления. Диоксид углерода – природный хладагент, не токсичен, не горюч, не опасен для озонового слоя, не является парниковым газом, но создает исключительно высокое давление в системе,

уступает синтетическим хладагентам в эффективности цикла, требует кардинальных изменений в дизайне холодильной установки. Появление гидрофторолефинов, призванных заменить гидрофторуглероды, в частности R134a, R404A, решает многие из перечисленных выше проблем, однако не устраняет одного из основных недостатков этих соединений – их воспламеняемости. Смеси диоксида углерода с гидрофторолефинами могут стать альтернативным решением снизить рабочее давление в системе, исключить воспламеняемость, улучшить энергетические характеристики цикла.

Рассматриваются смеси CO₂ с новыми перспективными хладагентами из группы гидрофторолефинов – R1234yf и R1234ze(Z). Изложены теоретические подходы к описанию одного из важнейших кинетических коэффициентов – теплопроводности, представленные в работах Шашкова и Абраменко, Роя и Тодоса, Смита, Петерса, Линдсея и Бромли, Уилки, Брокау, Бромлея, Мейсона.

В расчетах смесей использованы также данные о кинетических и термодинамических характеристиках компонентов. Методика расчета апробирована на экспериментальных данных, в частности, для бинарных смесей тетрафторэтана (HFC-134a) и дифторметана (HFC-32), а также для тройной зеотропной смеси HFC-407C. Подтверждена результативность расчетов, расхождения находились в пределах погрешности экспериментов различных авторов.

Приводятся значения теплопроводности бинарной смеси CO₂+R1234ze(Z) для двух мольных фракций 0,2977 и 0,6997 и двух мольных фракций 0,1996 и 0,7737 для смеси R1237yf в области температур 250–360 К.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ ВОДНОГО РАСТВОРА ДИОКСИДА ТИТАНА

*Сафаров М.М.,*¹ Яхьяев Ш.О.,¹ Сафаров Ш.Р.,¹ Хасанова С.С.,¹
Розиков К.С.,² Тиллоева Т.Р.,³ Махмадали К.,² Хусайнов З.К.²*

¹ФМГУ им. М.В. Ломоносова, Душанбе, Таджикистан, ²ТГПУ им. С. Айни, Душанбе, Таджикистан, ³ФМЭИ, Душанбе, Таджикистан

*mahmad1@list.ru

Благодаря своим свойствам сегодня диоксид титана используется при производстве широкого круга товаров различного назначения. Так, более 50% всего объема диоксида титана идет на изготовление товаров лакокрасочной отрасли (титановые белила), поскольку диоксид обладает отличными красящими свойствами. Это: краски (глянцевые, матовые и полуматовые, силикатные, кремнийорганические, порошковые, эмульсионные и с наполнителями для разнообразных строительных, ремонтных и промышленных работ, печати), лаки и эмали, смеси и растворы для грунтования, шпаклевки, штукатурки, цементирования, а также полиуретановые и эпоксидные покрытия, в том числе и для древесины. Диоксид титана, как и металл, белого цвета, поэтому используется он в качестве пигмента. Главное его достоинство — нетоксичность и безвредность. Кроме того, покрытия приобретают высокую стойкость к воздействиям ультрафиолета, не желтеют и практически не стареют. Для теплового расчета изделия и продуктов или их получения необходимо иметь теплофизические характеристики компонентов при различных температурах, давлениях и условиях внешних факторов. Для составления математической модели процесса теплообмена и теплопередачи, которые входят в критериальные параметры теории подобия. На основе теплофизических свойств материалов, можно вычислить коэффициент теплоотдачи (критерий Нуссельта), коэффициент массоотдачи, диффузии и другие характеристики объектов. Вышеперечисленные характеристики определяются экспериментальными методами или теорией. Теплоемкость жидкостей и их растворов при различных температурах и давлениях исследуется методом монотонного регулярного теплового режима

второго рода, разработанного профессором Сафаровым М.М. [1]. Общая относительная погрешность измерения теплоемкости при доверительной вероятности $\alpha = 0,95\%$ равна 4,5%.

1. Сафаров М.М. Теплофизические свойства простых эфиров и водных растворов гидразина в зависимости от температуры и давления. Дис. д-ра т.н., Душанбе, 1993.

ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА АМОРФНОГО УГЛЕРОДА (СТЕКЛОУГЛЕРОДА) В ОБЛАСТИ ЕГО АНОМАЛЬНОЙ СЖИМАЕМОСТИ ПРИ ДИНАМИЧЕСКИХ НАГРУЗКАХ

Молодец А.М., Савиных А.С., Голышев А.А.*

ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

**molodets@icp.ac.ru*

Стеклоуглерод является наноструктурированным метаматериалом, который в изотермических условиях статического сжатия обладает аномальной сжимаемостью (см. [1]).

Ранее в [2] нами было установлено образование ударных волн разрежения в стеклоуглероде, а также превращение фронта ударной волны в размытую волну сжатия, что в целом означает аномальную сжимаемость стеклоуглерода не только в статических условиях нагружения, но и в микросекундном ударно-волновом цикле сжатие-разгрузка.

В развитие результатов [2] в данной работе мы измерили эволюцию массовой скорости в одномерных импульсах сжатия, распространяющихся в образцах стеклоуглерода при его аномальном сжатии. Затем было выполнено математическое моделирование профилей скорости свободной поверхности в экспериментах по измерению откольной прочности и волны разрушения в рамках гидрокода, опирающегося на уравнения состояния стеклоуглерода из [2]. Результаты математического моделирования вместе с первичной экспериментальной информацией позволили определить откольную прочность и параметры волны разрушения в стеклоуглероде в области его аномальной сжимаемости.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-08-00237.

1. Zhao Z., Wang E.F., Yan H., et al. // Nature Comm. 2015. V. 6. P. 1.
2. Молодец А.М., Голышев А.А., Савиных А.С., Ким В.В. // ЖЭТФ. 2016. Т. 149. No. 2. С. 333.

РАСЧЕТ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ ГАЗОВ НА ОСНОВЕ ГЕЛИЯ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ КОЭФФИЦИЕНТА ВОССТАНОВЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

Кочуров Д.С., Елецкий И.А., Котова Е.С.*

МГТУ, Москва, Россия

**kochurov_ds@yahoo.com*

Существует множество экспериментальных данных по значению коэффициента восстановления температуры на стенке r [1] при сжимаемом течении воздуха ($Pr \approx 0,7$), однако данные об экспериментах при течении бинарных смесей газов на основе гелия He при меньших Pr (от 0,2 до 0,7) в открытой печати отсутствуют. Для проведения экспериментов по определению r необходимо создать надежную методику расчета теплофизических и

транспортных свойств (и значений Pr) бинарных смесей газов и верифицировать ее по экспериментальным данным в широком диапазоне давлений и температур. Такая методика может быть использована также при проектировании устройств газодинамической температурной стратификации [2] в составе замкнутых газотурбинных установок (ЗГТУ) [3], а также узлов самих ЗГТУ.

В работе выполнен анализ известных методик расчета (на основе потенциальных параметров, квантовомеханических расчетов по известным потенциалам межмолекулярного взаимодействия, закона соответственных состояний, а также эмпирических полиномов) транспортных свойств бинарных смесей на основе He . Приведено сравнение результатов расчетов с доступными в открытой печати экспериментальными данными для смесей $He - Ar$, $He - N_2$, $He - Kr$, $He - Xe$ в полном диапазоне их составов при давлениях до 10 МПа и температурах до 2000 К. По результатам анализа предложена доработанная методика на основе закона соответственных состояний с применением последних известных результатов квантовомеханических расчетов. Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 14-19-00699 (руководитель академик РАН Леонтьев А.И.).

1. Леонтьев А.И. Газодинамический метод энергоразделения газовых потоков // ТВТ, 1997. Т.35. №1. С. 157 – 159.
2. Бурцев С.А., Леонтьев А.И. Исследование влияния диссипативных эффектов на температурную стратификацию в потоках газа (обзор) // ТВТ, 2014. Т.52. №2. С. 310 – 322. DOI: 10.7868/S0040364413060069.
3. Леонтьев А.И., Бурцев С.А. Цикл замкнутой газотурбинной установки с устройством газодинамического энергоразделения // Доклады АН, 2017. Т.476. №3. С. 290 – 292. DOI: 10.7868/S086956521727010X.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ МЕТИЛОВОГО СПИРТА

Сафаров М.М.,¹ Адужалилзода Ф.,² Холиков М.М.,³ Рафиев С.С.⁴

¹ФМГУ им. М.В. Ломоносова, Душанбе, Таджикистан, ²ТГПУ им. С. Айни, Душанбе, Таджикистан, ³ТПИ ТТУ, Худжанд, Таджикистан, ⁴ЭНТ, Бохтар, Таджикистан

*mahmad1@list.ru

В последнее время в качестве теплоносителей солнечных коллекторов используются водные растворы метилового спирта. Для тепловых расчетов солнечных коллекторов необходимо иметь температурную зависимость теплофизических свойств данных теплоносителей, т.е. для проведения теплового расчета коллекторов необходимо знать эффективный коэффициент теплопроводности растворов при различных температурах (293–473) К и давлениях (0,101–29,42) МПа. Для исследования теплопроводности растворов в зависимости от температуры и давления использован метод регулярного теплового режима первого рода (цилиндрического бикалориметра, разработанного профессорами Голубевым И. Ф. и Гусейновым К.Д.). Данная установка была модернизирована профессором Сафаровым М.М. и его учениками, т. е. она подключена к компьютеру. Аппаратура для измерения теплопроводности в основном состоит из цилиндрического бикалориметра, грузопоршневого манометра, пережимного сосуда высокого давления, системы электроизмерительных приборов, ПК и др.[1]. Общая относительная погрешность измерения теплопроводности при доверительной вероятности $\alpha = 0,95$ % равна 3,2 %.

Для проверки надежности и точности работы экспериментальной установки, нами были проведены контрольные измерения. В качестве контрольных образцов нами использован жидкий толуол, бензол, н-гексан и воздух. Результаты контрольных измерений показали, что они в пределе погрешности измерения теплопроводности данным методом

качественно и количественно совпадают с литературными данными [1]. Установлено, что теплопроводность растворов с ростом температуры уменьшаются а с увеличением давления растут.

1. Сафаров М.М. Теплофизические свойства простых эфиров и водных растворов гидразина в зависимости от температуры и давления. Дис. д-ра т.н., Душанбе, 1993.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ СМЕСИ R-125/R-134a (39/61) В ПАРОВОЙ ФАЗЕ

Расчектаева Е.П., Станкус С.В., Верба О.И.*

ИТ СО РАН, Новосибирск-90, Россия

**raschektaevaep@gmail.com*

В работе исследовалась озонобезопасная смесь 39,2 мас. % пентафторэтана (R-125) и 60,8 мас. % 1,1,1,2 – тетрафторэтана (R-134a). Актуальность составления новых смесей и исследования их теплопроводности обосновывается постоянным поиском составов с оптимальным сочетанием высокой эффективности, ценовой доступности, экологической безопасности и удобства использования. Предложенная смесь готовилась в лаборатории весовым методом, предельная погрешность взвешивания составляла 0,1 г.

Измерения теплопроводности были выполнены стационарным методом коаксиальных цилиндров в интервалах температур от 320 до 415 К и давлений от 0,1 МПа до 1,8 МПа. Подробное описание методики измерений и проведения эксперимента содержит работа [1]. Измерительная ячейка состояла из двух вертикально расположенных соосных никелевых цилиндров: внешний — длиной 140 мм, внутренний — 101,3 мм. Ширина кольцевого зазора между цилиндрами составляла 0,366 мм. Для измерения температуры цилиндров и перепада температуры между ними использовались медь-константановые термопары. Влияние свободных концов на значения теплопроводности учитывалось введением соответствующих поправок [1]. Заполнение измерительной ячейки исследуемой смесью происходило из жидкой фазы, что позволило избежать изменения в составе смеси. Погрешность экспериментальных данных по теплопроводности составляла 1,5 –2,5 %, по температуре — 0,05 К, давлению — не более 4 кПа.

Результаты измерений обрабатывались эмпирической зависимостью:

$$\lambda(T, p) = a_0 + a_{10} \cdot \frac{T}{100} + a_{20} \cdot \frac{100}{T} + p \cdot (a_{11} \cdot \frac{T}{100} + a_{21} \cdot \frac{100}{T}) + p^2 \cdot (a_{12} \cdot \frac{T}{100} + a_{22} \cdot \frac{100}{T}), \quad (1)$$

где T — в К, p — в МПа, λ — в мВт/(м·К). В работе показано, что зависимость (1) можно применить в широкой области параметров от атмосферного давления до давления на линии конденсации. Используя (1) рассчитаны справочные таблицы температурных и барических зависимостей теплопроводности смеси и определены их погрешности.

1. Верба О.И., Груздев В.А. Теплопроводность гептафторпропана НФС - 227ea // Теплофизика и аэромеханика. 2002. Т. 9. №. 3. С. 467.

РАБОЧИЕ ВЕЩЕСТВА С НИЗКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ ГЛОБАЛЬНОГО ПОТЕПЛЕНИЯ В ТЕХНИКЕ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР

*Митропов В.В.,*¹ Цветков О.Б. О.Б.,¹ Лантев Ю.А.,¹ Бабич А.Ю.²*

¹СПбГИТМО, Санкт-Петербург, Россия, ²СПбГПУ, Санкт-Петербург, Россия

**v_mit@mail.ru*

Широко используемые в качестве рабочих веществ гидрофторуглероды имеют высокие потенциалы глобального потепления. В контексте возможных альтернативных решений, минимизирующих парниковый эффект, в докладе рассмотрены изомеры пропилена. Изомеры нестабильны, двойная связь в молекуле изомера легко разрушается в атмосфере Земли, что привлекательно с точки зрения применения гидрофторолефинов в качестве экологически безопасных рабочих веществ холодильных систем, тепловых насосов и органических циклов Ренкина.

Представлены классификация, физико-химические свойства, термодинамические характеристики три-, тетра- и пентафторпропенов, цис- и трансизомеров, линии фазового равновесия в T-s диаграммах. Обсуждается состояние исследований термодинамических и теплофизических свойств, эффективность циклов на гидрофторолефинах в сравнении с известными циклами на R410A, R134a, R152a, других гидрофторуглеродах. Показаны смесевые композиции изомеров пропилена с гидрофторуглеродами, способные оперативно заменить HCFC-22, HFC-32, HFC-134a, неизотермичность фазовых переходов, возможная пожароопасность.

ВЛИЯНИЕ МАЛЫХ ДОБАВОК Ni, Co, Fe НА ВЯЗКОСТЬ ЖИДКОГО АЛЮМИНИЯ

Бельтюков А.Л., Меньшикова С.Г., Ладьянов В.И., Корепанов А.Ю.*

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

**albeltyukov@mail.ru*

Вязкость является одним из наиболее структурно чувствительных свойств расплава и измерения её температурных и концентрационных зависимостей часто используются при изучении особенностей строения жидких сплавов и анализе межчастичного взаимодействия в них.

В данной работе исследованы температурные и концентрационные зависимости кинематической вязкости расплавов систем Al-Ni, Al-Co и Al-Fe с содержанием второго элемента до 10 ат.%.

Для жидкого алюминия и расплавов систем Al-Ni, Al-Co, Al-Fe с малым содержанием легирующего элемента (до 1.0 ат.% Ni и до 1.4 ат.% Co и Fe) обнаружено отклонение температурных зависимостей вязкости от аррениусовской зависимости, обусловленное структурным превращением в жидком алюминии.

Для всех трех систем увеличение содержания легирующего элемента приводит к росту вязкости расплава. Для системы Al-Ni концентрационная зависимость вязкости имеет немонотонный характер с максимумом вблизи 1.5 ат.% и минимум в интервале 2-2.7 ат.% Ni. В системах Al-Co и Al-Fe изотермы вязкости монотонны.

Обнаруженные особенности температурных и концентрационных зависимостей вязкости расплавов объясняются образованием кластеров из атомов разного сорта и зависимостью их состава от содержания легирующего элемента. При малых концентрациях легирующего элемента (ЛЭ) в расплаве образуются кластеры, состоящие из атома ЛЭ и окружающих его атомов Al (кластер Al(ЛЭ)). С увеличением содержания легирующего элемента происходит рост количества кластеров Al(ЛЭ) и уменьшение объемной доли

расплава с ближним упорядочением, характерным собственно для жидкого алюминия. При дальнейшем легировании по достижении определенной концентрации атомов ЛЭ в некоторой локальной области расплава образуются более крупные кластеры с ближним упорядочением, близким к интерметаллическому соединению. В системе Al-Ni это может быть интерметаллид Al_3Ni .

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (№ гос. регистрации темы АААА-А17-117022250039-4).

ФАКТОР МАКСВЕЛЛА ДЛЯ ПАРОВ 2,3,3,3-ТЕТРАФТОРПРОПЕНА И ЦИС-1,3,3,3-ТЕТРАФТОРПРОПЕНА

*Цветков О.Б.,^{*1} Лаптев Ю.А.,¹ Просторова А.О.,² Винцаревич А.В.²*

¹СПбГИТМО, Санкт-Петербург, Россия, ²СПбГПУ, Санкт-Петербург, Россия

**obereg@softrex.com*

Согласно решениям климатического Саммита в Париже (2015 г.) и Кигалийской поправки к Монреальскому протоколу 2016 года ограничивается применение значительного числа хладагентов гидрофторуглеродного класса, имеющих высокий потенциал глобального потепления. Альтернативное решение – новые перспективные хладагенты – 2,3,3,3-тетрафторпропен и цис-1,3,3,3-тетрафторпропен. Молекулы пропенов имеют двойную связь, а индексы «цис» и «транс» характеризуют особенности расположения атомов фтора и водорода в двойной связи. В отличие от гидрофторуглеродов потенциал глобального потепления пропенов исключительно мал, в частности, потенциал 2,3,3,3-тетрафторпропена меньше единицы. Для теплопроводности паров, входящей в комплекс Максвелла, следуя теоретическим разработкам Мейсона и Мончика, учтены вклады поступательного движения и внутренней энергии молекул, колебательных и вращательных степеней свободы молекул, числа столкновений для вращательной и колебательной релаксации энергии, коэффициенты диффузии внутренних степеней свободы. Влияние неупругих соударений и числа столкновений для вращательной релаксации оценивалось по Паркеру. С позиций молекулярно-кинетических представлений для модели потенциала Леннарда-Джонса 12–6 найдены интегралы столкновений и значения динамической вязкости. Дан анализ температурной зависимости фактора Максвелла с позиций теории термодинамического подобия, в том числе для прогностических оценок данных о кинетических коэффициентах.

ОСКОЛКИ ДЕЛЕНИЯ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ПЕРВИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ДЕЛЯЩЕЙСЯ ПЛАЗМЕ

*Шапиева А.Е.,^{*1} Кунаков С.К.,² Сон Э.Е.^{1,3}*

¹МФТИ, Долгопрудный, Россия, ²КазНУ, Алматы, Казахстан, ³ОИВТ РАН, Москва, Россия

**shapieva.ae@gmail.com*

После появления кинетической теории неравновесных свойств газов огромное количество публикаций было выпущено в свет [1]. Большинство из них сосредоточено на корректровке кинетического уравнения Больцмана в разных областях применения. Одним из наиболее цитируемых является [2], в котором изучаются высокочастотные газовые разряды для слабоионизованной плазмы, в которой существуют ограниченные условия.

Основное внимание в этой работе уделяется разработке методов расчета энергетических распределений в газе с низкой плотностью ионов под действием высокочастотного

электрического поля. Предположение о том, что начальная и конечная скорости налетающей частицы очень близки друг к другу, приводит к достаточному количеству ограничений в использовании определенных приложений. Высокоэнергетические электроны взаимодействуют с атомами не как в классической модели (сфера с некоторыми жесткими объектами), а как со сложной динамической системой заряженных частиц, находящейся в состоянии динамического равновесия и фактически взаимодействующей с движущимися электронами, находящимися на верхних орбиталях. Что является источником первичных электронов, это и есть очень важная проблема, которая не обсуждалась и не определялась. Идентификация быстрых электронов с энергией около МэВ (убегающий электрон) хоть и обсуждалась [3], но так и не была окончательно решена. Вопросы о том, в каком энергетическом диапазоне начинается и заканчивается излучение (тормозное излучение), и как учесть образование рентгеновских лучей в кинетическом уравнении остались открытыми. Рентгеновские лучи также можно рассматривать как электроны (длина волны де Бройля по порядку равна рентгеновской волне) [4]. Кроме того возникает вопрос: не приводит ли поглощение рентгеновских лучей электронами к увеличению кинетической энергии до МэВ-ных энергий, где обычно осцилляции нейтрино связаны с присутствием β -электронов. В настоящем докладе подробно представлен аналитический вид кинетического уравнения Больцмана, а точнее говоря, системы самосогласованных кинетических уравнений, определяющие кинетические уравнения образования продуктов деления и электронов, описывающие энергетические спектры быстрых частиц в ядерной возбуждаемой плазме. Определены и представлены в детальном виде спектры первичных электронов для слабо ионизированной плазмы, взаимодействующей с нейтронами. Аналитические выражения спектров первичных электронов были получены в первом приближении на основе монохроматических энергетических спектров продуктов деления изотопов гелия-3, представленных в виде δ -функций. Выражения для первичных электронов, рожденных из ядер трития, также получены численным и аналитическим способом предлагаемой системой решения кинетических уравнений. Первичные электроны в свою очередь могут также вызвать процессы ионизации. Распределение энергии для первичных электронов, созданных быстрыми электронами, рожденных из протонов и ядер трития определено и сравнивается со статистическими расчетами на основе метода Монте-Карло.

-
1. Chapman S., Cowling T. G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases.* // Camb. Univ. Press. 1952. P. 431.
 2. Holstein T. *Energy distribution of Electrons in High Frequency Gas Discharges.* // Phys. Res. A. 1946. V. 70. P. 367.
 3. Gurevich A. V., Zybin K. P. *Runaway Breakdown and the Mysteries of Lightning.* // Phys. Today. 2005. P. 37.
 4. Loeb L. B. *The Mechanisms of Stepped and Dart Leaders in Cloud-to-Ground Lightning Strokes.* // J. Geophys. Res. 1995. V. 71. P. 4711.

**THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF 1-BUTYL-3-METHYLIMIDAZOLIUM
TRIFLUOROMETHANESULFONATE**

*Guluzade A.,¹ Safarov J.,*² Hassel E.,² Abdulagatov I.³*

¹*AZTU, Baku, Azerbaijan,* ²*UNI Rostock, Rostock, Germany,* ³*DGU, Makhachkala, Russia*

**javid.safarov@uni-rostock.de*

Ionic liquids are salts that are liquids at ambient temperatures and included to the green chemistry solvents. They have small vapor pressure, low melting point, high solvating capacity, high ionic conductivity and high thermal stability, which make them attractive for practical applications.

In this work, we will present the thermophysical properties of 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate, [BMIM][TFO] at pressures up to $p = 140$ MPa and over a temperature range $T = (283.15 \text{ to } 413.15)$ K. These investigations covering such an extended p, T -range were performed the first time. The experiments were carried out using a specially adapted high pressure – high temperature Anton Paar DMA HPM vibration-tube densimeter with an estimated relative combined standard uncertainty up to $\Delta\rho/\rho = \pm 0.08$ % in density. The temperature T in the measuring cell is administrated with an error of ± 10 mK and is measured using the (ITS-90) Pt100 thermometer with an experimental error of ± 15 mK. Pressure p is measured with a relative uncertainty of 0.1 % (up to 100 MPa) and 0.5 % (up to 140 MPa), respectively, of the measured value.

The density values $\rho(p_0, T)/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ at ambient pressure and at $T = (283.15 \text{ to } 413.15)$ K were investigated using the combination of the Anton Paar DMA 5000M, DSA 5000M and DMA HPM vibration tube densimeters with an uncertainty of $\Delta\rho = \pm(5 \cdot 10^{-3} \text{ to } 3 \cdot 10^{-1}) \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$. The constant pressure specific heat capacity $c_p(p_0, T)/\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\text{K}^{-1}$ is measured at $T = (283.15 \text{ to } 413.15)$ K using the DSC differential scanning calorimetry. The speed of sound values $u(p_0, T)/\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ at ambient pressure and temperatures at $T = (283.15 \text{ to } 343.15)$ K are investigated using the Anton Paar DSA 5000M vibration tube densimeter and sound velocity meter.

The dynamic viscosity $\eta(p_0, T)/\text{mPa}\cdot\text{s}$ of [BMIM][TFO] at ambient pressures and at $T = (283.15 \text{ to } 413.15)$ K is measured using an Anton Paar SVM 3000 Stabinger Viscometer and Rheometer MCR 302.

The literature values available were subject to a consistency check with our data. An equation of state was established using parameters based on the new results to calculate the isothermal compressibility κ_T , isobaric thermal expansibility α_p , thermal pressure coefficient γ , internal pressure p_{int} , specific heat capacities at constant pressure c_p and at constant volume c_v , speed of sound u , and isentropic exponent κ_s of this IL.

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КЛАСТЕРОВ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В ШИРОКОЙ ОБЛАСТИ ПАРАМЕТРОВ СОСТОЯНИЯ

Вервейко В.Н., Вервейко М.В.*

КГУ, Курск, Россия

**verveykovn@mail.ru*

Кластеры в жидкостях определяют структурные характеристики и теплофизические свойства жидкостей. Ранее авторы предложили соотношение для функции распределения кластеров в жидкостях по числу частиц, содержащихся в кластере [1]: $f(Z) = \frac{\lambda^m}{6} \cdot Z^{m-1} \cdot e^{-\lambda Z}$, $Z \geq 0$, где Z – число частиц в кластере, $\lambda > 0$ ($\lambda = 1/\theta$) – параметр масштаба, определяемый физическими свойствами жидкости, $m = 4$ – порядок распределения.

Параметр θ является функцией коэффициента молекулярной упаковки η : $\theta = a_1\eta + a_2\eta^2 + \dots + a_n\eta^n \approx (5/2)\eta e^\eta \approx (5/2)(1 + \eta)$, где a_i – коэффициенты разложения в ряд; $\eta \approx 0.22\rho^*$, где $\rho^* = \rho/\rho_c$ – приведенная плотность жидкости.

Используя распределение вероятностей размера кластера по числу частиц и экспериментальные данные по плотности жидкостей, мы оценили и проанализировали наиболее вероятное число частиц в кластере: $\hat{Z} = \frac{m-1}{\lambda} = (m-1)\theta = 3\theta$, среднеарифметическое

число частиц в кластере: $\bar{Z} = \int_0^\infty Z \cdot f(Z) dZ = \frac{m!}{(m-1)! \lambda} \frac{1}{\lambda} = \frac{m}{\lambda} = m\theta = 4\theta$ и среднеквад-

ратичное число частиц в кластере: $\overline{\overline{Z}} = \sqrt{\bar{Z}^2} = \frac{\sqrt{m(m+1)}}{\lambda} = \sqrt{m(m+1)} \cdot \theta = \sqrt{20} \cdot \theta$ бензола, толуола и их галогенозамещенных в зависимости от параметров состояния при температурах 293–423 К и давлениях 0.1–600 МПа.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (РФФИ) (Проект №16-08-01203).

1. Verveyko V.N., Verveyko M.V., Melnikov G.A. // Eur. Phys. J. D. 2016. V. 70. P. 47.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕРМИЧЕСКОГО РАСШИРЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНЫХ ПРОКЛАДок

Борисенко Д.И., Кузнецов К.И., Сухих А.А., Шили А.И.*

МЭИ, Москва, Россия

**dima-luxinzhi@mail.ru*

Коэффициент термического расширения является важной теплофизической характеристикой. Объект исследования — теплоотводящие прокладки — отечественные аналоги материалов серии SilPad, GapPad и Bond-Play зарубежного производства, широко представленных на рынке электронного оборудования.

Для выполнения поставленной задачи разработана и изготовлена установка по измерению термического расширения. Погрешность измерения коэффициента термического расширения определяется точностью измерения линейного перемещения индикатора и точностью фиксации температуры (погрешность измерения температуры 0,5 процента). Предел допускаемой погрешности индикатора в вертикальном положении на участке шкалы не превышает: в пределах 200 делений 2 мкм; в пределах 1 мм – 2,5 мкм и при толщине образца в 5 мм не превышает 0,1 процента.

При положительных значениях температуры расхождение коэффициента термического расширения отечественных образцов и американских аналогов не превышает 10 процентов.

Исследования проводились в интервале температур от -140°C до 150°C . Проведены аттестационные измерения на образцах из фторопласта 4. Опытные данные сопоставлены с известными литературными источниками [1, 2].

Результаты измерения термического расширения теплоотводящих прокладок получены впервые. Зафиксированы также пределы термической стойкости новых материалов. Обнаружен эффект «гистерезиса» зависимости приращения высоты испытываемых образцов от температуры при процессах нагрева и охлаждения.

1. Фторопласты в машиностроении. Горяинова А.В., Божков Г.К. и Тихонова М.С., — М.: «Машиностроение», 1971, 233 стр.
2. Авиационный технический справочник. Александров В. Г., Майоров А. В., Потюков Н. П. — Издательство «Транспорт» Изд. 2-е, 1975, 432 стр.

ГОРЯЧИЕ ЦЕНТРЫ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ГАЗОНАСЫЩЕННЫХ СЛОЯХ АМОРФНОГО ЛЬДА

Файзуллин М.З., Виноградов А.В., Томин А.С., Коверда В.П.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**faizullin@itp.uran.ru*

Отличительной особенностью кристаллизации при интенсивном зародышеобразовании в аморфных твердых телах является возможность спонтанного возникновения «горячих» центров и взрывной кристаллизации в местах локального скопления флуктуационно возникающих зародышевых кристаллов. Условие возникновения «горячих» центров в аморфной среде с замороженными кристалликами требует их локально высокой концентрации, которая может быть достигнута как в результате естественного процесса нуклеации, так и при внешнем воздействии на неравновесную систему.

В серии проведенных опытов показана возможность инициирования взрывной кристаллизации в слоях аморфного льда, насыщенных метаном, в присутствии искусственно внесенных зародышевых кристаллов. Неравновесные аморфные конденсаты получали сверхзвуковым осаждением молекулярных пучков разреженного пара и газа на охлажденную жидким азотом подложку. Адиабатическое расширение молекулярного потока пара на выходе из сверхзвукового сопла приводило к понижению температуры и образованию кристаллических кластеров льда в молекулярном потоке. Присутствие готовых кристаллических центров в образце сдвигало начало кристаллизации в область низких температур, а сама форма теплового сигнала, состоящего из нескольких пиков, свидетельствовала о кристаллизации из разных центров.

Инициированная взрывная кристаллизация газонасыщенных слоев аморфного льда исследовалась также воздействием локального теплового нагрева при температуре ниже температуры самопроизвольной кристаллизации образца. Нагрев осуществлялся кратковременным тепловым импульсом с использованием электрического проволочного зонда или лазерного пучка.

Кристаллизация водно-газовых слоев в условиях сильной метастабильности приводит к образованию газового гидрата. Лавинообразное зарождение центров кристаллизации замораживает молекулы газа и не приводит к их вытеснению фронтом кристаллизации.

Работа поддерживалась Российским фондом фундаментальных исследований (проекты № 18-08-00352-а, № 18-38-00443 мол-а) и Программой фундаментальных исследований

УрО РАН (№ 18-2-2-3).

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ МОЧЕВИНЫ И НЕКОТОРЫХ ЕЕ АЛКИЛ ПРОИЗВОДНЫХ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ПАРАМЕТРОВ СОСТОЯНИЯ

Егоров Г.И., Макаров Д.М.*

ИХР РАН, Иваново, Россия

**gie@isc-ras.ru*

Величина изменения объема при образовании жидкофазной смеси определяется изменениями межмолекулярных и внутримолекулярных взаимодействий, их энергией, наличием Н-связей, гидрофобных или гидрофильных групп и т.д. При варьировании внешних параметров состояния (давления и температуры), объемные свойства смеси будут определяться как геометрией ее составляющих молекул, так и их упаковкой, и их способностью трансформироваться.

В докладе рассматриваются объемные свойства и структурные организации водных растворов мочевины и ее алкил производных. Как известно из многих литературных источников, мочевина является денатурирующим белок веществом, которое очень активно также участвует во многих других биологических процессах. Действия алкил производных мочевины, являются подобными, все они относятся к дестабилизаторам белка. Механизм, по которому мочевина денатурирует белки в водных растворах, до сих пор еще до конца не объяснен: или молекулы мочевины взаимодействуют с макромолекулой прямо, или влияют на стабильность белка через окружение воды изменением ее свойств. Результаты исследований до сих пор противоречивы. Одни показывают, что мочевина может вписаться в водную структуру как «водоподобная» молекула и при этом она вообще не влияет на взаимодействие вода-вода, другие, — относят мочевины к «разрушителям» структуры воды, третьи — к «структурообразователям».

В докладе приводятся результаты экспериментального исследования плотности при атмосферном давлении и сжимаемости (относительного изменения объема) изученных водных растворов мочевины и его алкил производных аналогов в интервалах давлений от 0.101 до 100 МПа и температур от 278.15 до 323.15 К. Обсуждаются рассчитанные мольные изотермические сжимаемости, мольные изобарные расширяемости, коэффициенты изохорного термического давления, внутреннее давление смеси. Рассматриваются также парциальные мольные объемы компонентов, в том числе и предельные парциальные мольные объемы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-43-370010а).

КЛАСТЕРЫ В «ПРОСТЫХ» И «НОРМАЛЬНЫХ» ЖИДКОСТЯХ

Радченко А.К., Шахов А.В., Неручев Ю.А.*

КГУ, Курск, Россия

**radchenko.antoshka@mail.ru*

Предложено соотношение для оценки особенностей структуры молекулярной жидкости по данным о её теплофизических свойствах.

$$T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_V = B_0 \left(1 - \frac{\langle n \rangle - 4/3}{Z^*} \right) \rho^3 + \frac{1}{\langle n \rangle} \frac{RT}{M} \rho$$

Показано, что зарождение жидкой фазы сопровождается димерной ассоциацией молекул.

В «простых» одноатомных жидкостях при понижении температуры число частиц в ассоциатах (кластерах) возрастает, что приводит к формированию в жидкости «ближнего» порядка. Этот процесс подтверждают данные рентгеноструктурных исследований и результаты измерений изохорной теплоемкости аргона, криптона и др.

Напротив, в жидкостях с многоатомными молекулами, исключая жидкости с водородными связями, практически на всей кривой равновесия жидкость-пар вплоть до области кристаллизации наблюдается лишь димерная ассоциация.

Полученные результаты указывают на то, что, как и в жидких углеводородах в «простых» жидкостях помимо дисперсионных сил ($m=6$), сил отталкивания ($n=12$) проявляют себя дальнедействующие слабые химические силы связи «кулоновского» вида [1], ответственные за ассоциацию частиц. Характер ассоциации определяется особенностями симметрии молекул.

Работа поддержана грантом РФФИ 16-08-01203А.

-
1. Hobza P., Muller-Dethlefs K. Non-covalent Interactions: Theory and Experiment. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2010.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ТИОСУЛЬФАТА НАТРИЯ

Соболь О.В.

ГОУ ВПО ДонНАСА, Макеевка, Украина

cluck@mail.ru

Анализ литературы [1, 2] свидетельствует о том, что выбор тех или иных материалов для аккумуляции тепла (холода) осуществляется скорее методом проб и ошибок, а не в результате систематических целенаправленных исследований. Отсутствуют надежные экспериментальные данные по теплотам плавления и кристаллизации, переохлаждениям, устойчивости теплофизических свойств при многократно чередующихся процессах типа «плавление ↔ кристаллизация» и т.д.

В данной работе методом ДТА получены термограммы плавления и кристаллизации образцов в системе вода–пентагидрат тиосульфата натрия. Установлен «автономный» характер экзо-эффектов. Наблюдается устойчивая закономерность: с увеличением концентрации ТСН-5 экзо-эффекты уменьшаются относительно эвтектической температуры и увеличиваются относительно температуры ликвидус. Для всех образцов энтальпия неравновесной кристаллизации была всегда ниже на 15-20 % энтальпии плавления. Закономерность изменения общей энтальпии кристаллизации от основного компонента к эвтектике происходит по U-образному закону.

-
1. Мозговой А.Г., и др. Теплофизические свойства теплоаккумулирующих материалов. Кристаллогидраты. Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. // ТФЦ. – М.: ИВТАН. 1990.
 2. Данилин В.Н. Тепло- и холодоаккумулирующие материалы. Физико-химический анализ свойств многокомпонентных систем. Вестник Кубанского гос. тех. ун-та. – 2008.

ЛИНИЯ ПЛАВЛЕНИЯ ТИТАНА: СОГЛАСОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Кулямина Е.Ю., Зицерман В.Ю., Фокин Л.Р.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**kulyamina.elen@gmail.com*

Работа продолжает выполненные в ОИВТ РАН исследования свойств Ti [1], распространив их на линию плавления при давлении до 90 ГПа. На сегодняшний день известны точка плавления $T_m^0 = 1944 \pm 3$ К, соответствующая ОЦК фазе, и теплота плавления с погрешностью 5 %; надежные данные о скачке объема отсутствуют. Впервые опытные данные по кривой плавления в интервале 15–80 ГПа получены в 2001 г. [2] методом алмазных наковален. Экстраполируя их к давлению 1 атм, авторы получили аномально низкое значение наклона кривой плавления ~ 7 К/ГПа, не свойственное тугоплавким металлам.

Здесь проведена обработка данных [3], согласованная с оценкой скачка объема в точке плавления. Неточность в его определении из данных о плотности обеих фаз вынудила нас прибегнуть к анализу зависимости скачка объема от энтропии плавления для 3d элементов, от Ti до Ni. Для Ti получена оценка $\Delta V_m = 0.257 \pm 0.026$ см³/моль, что дало значение начального наклона кривой плавления $(dT_m/dp)_{p \rightarrow 0} = 35 \pm 5$ К/ГПа [4]. Согласованное с этой оценкой и воспроизводящее данные [3] уравнение Симона хорошо передает плавное снижение наклона при высоких давлениях.

Заметим, что без учета данных [3] следовал бы вывод о почти неизменной крутизне линии плавления во всем интервале. Именно это заключение получено в [5], где диаграмма состояния Ti построена без использования результатов [3].

-
1. Chekhovskoi V.Ya., Fokin L.R., Peletskii V.E. et al. Handbook of Titanium Based Materials: Thermophysical Properties. Data and Studies. NY: Begell House, 2007. 275 p.
 2. Errandonea D., Schwager B., Ditz R. et al. Systematics of transition metals melting // Phys. Rev. B. 2001. V. 63. P. 131–134.
 3. Stutzmann V., Devaële A., Bouchet J. et al. High-pressure melting curve of titanium // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. 224110.
 4. Кулямина Е.Ю., Зицерман В.Ю., Фокин Л.Р. Согласование термодинамических свойств на линии плавления титана: проблемы, результаты // ЖТФ. 2018. Т. 88. No 3. С. 380–384.
 5. Елькин В.М., Михайлов В.Н., Михайлова Т.Ю. Полуэмпирическое уравнение состояния твердых α, ω, β – фаз титана и жидкости с учетом испарения // ВАНТ. Серия «Теоретическая и прикладная физика». 1977. Вып. 1. С. 28–42.

О ВОЗМОЖНОСТИ СУЩЕСТВОВАНИЯ ДВОЙНОГО МАКСИМУМА НА ИЗОТЕРМЕ АДсорбЦИИ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

*Лесев В.Н.,*¹ Алчагиров Б.Б.,¹ Дадашев Р.Х.,² Кясова О.Х.,¹ Узденова А.Н.¹*

¹КБГУ, Нальчик, Россия, ²ЧГУ, Грозный, Россия

**lvn_kbsu@mail.ru*

Изучение адсорбционных явлений в металлических расплавах имеет большое значение для развития теории поверхностных явлений и практики разработки новых технологических процессов. Но, как показывает анализ литературы, на изотермах адсорбции ряда бинарных систем обнаруживаются двойные максимумы, например, на изотерме адсорбции калия в сплавах с натрием (П. Пугачевич и сотр.). При этом оказалось, что величина и положение первого максимума согласуется с теорией поверхностных явлений В. Семенченко, но объяснение второго максимума в рамках этой теории затруднительно. В

связи с этим нами рассматривается вопрос о самой возможности существования двойного максимума на изотермах адсорбции поверхностно-активных компонентов в двойных жидкометаллических расплавах на примере сплавов Рb на основе In, в которых Рb является поверхностно-активным компонентом. С этой целью, используя собственные опытные данные об изотерме ПН системы In-Pb, мы рассчитали адсорбцию свинца на поверхности сплавов для $T = 573$ К.

Из результатов расчета адсорбции Рb в сплавах с In по Гуггенгейму - Адаму в «N»-варианте следует, что на изотерме адсорбции действительно обнаруживаются два максимума при содержаниях 0,12 и 0,17 ат. долей Рb в сплавах с индием. Более того, возможность появления двойного максимума на изотерме адсорбции по сути «заложена» и в самой расчетной формуле, представляющей собой произведение двух сомножителей: параболы $(x_{In}x_{Pb}) = x_{Pb}(1 - x_{Pb})$ и гиперболы $(d\sigma/dx_{Pb})_T$, в которых концентрации x_i выражаются в атомных долях при условии нормировки $x_{Pb} + x_{In} = 1$. Для сплавов с участием поверхностно-активного компонента изотермы $d\sigma/dx$ обычно представляют собой быстроспадающие функции составов сплавов, т.е. гиперболу. В результате умножения координат точек пересекающихся параболы и гиперболы в плоскости « $d\sigma/dx$ -состав сплавов» и появляются искомые максимумы на адсорбционной кривой.

Таким образом, расчеты адсорбции свинца в сплавах с индием и анализ самой формулы Гуггенгейма - Адама показывают возможность появления двойных максимумов на изотермах адсорбции поверхностно-активных компонентов в бинарных жидкометаллических растворах.

ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ КАРБИДА ЦИРКОНИЯ

Пахомов Е.П.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

evg-pakhomov@yandex.ru

При анализе характера упорядоченного равновесного распределения вакансий углерода в кристаллической решетке нестехиометрического карбида циркония ZrC_x обращено внимание на образование слоистой структуры (чередования в решетке полностью заполненных слоев и слоев с «химическими» вакансиями). Это позволило установить механизм начала распада кристаллической решетки и, соответственно, определить положение границ ее области гомогенности, зависимость концентрации «термических» вакансий от температуры, а также определить состав образующихся при этом вторых фаз. Получено, что, для $x = 0.5625$ граница устойчивости вертикальна до $T = 3000$ К, в области $x = 0.75-0.875$ температура плавления максимальна и постоянна, в области $x = 0.125-2$ расплав, вероятно, имеет молекулярную структуру, при чем в области $x = 0.75-0.875$ видимо образуется купол несмешиваемости.

**ПРОГРАММА ДЛЯ СОВМЕСТНОЙ ОБРАБОТКИ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ПО ИНКРЕМЕНТАМ ЭНТАЛЬПИИ
И ПРЯМЫМ ИЗМЕРЕНИЯМ ТЕПЛОЁМКОСТИ**

*Синева М.А.,*¹ Аристова Н.М.,¹ Белов Г.В.,^{1,2} Морозов И.В.¹*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МГУ, Москва, Россия

**maria.a.sineva@gmail.com*

Экспериментальные данные по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ в конденсированной фазе зачастую представлены в табличном виде, и их необходимо аппроксимировать некоторыми функциями, которые позволяют восстановить данные с приемлемой точностью. Эти функции могут быть затем использованы в термодинамическом моделировании и других областях исследований. Существуют различные программы для обработки данных по термодинамическим свойствам веществ: для обработки низкотемпературной теплоёмкости [1], для высокотемпературных данных, измеренных, например, методом лазерной вспышки, а также существует ряд отдельных методов обработки данных по приращениям энтальпии, полученных классической калориметрией. Наполнение баз данных (ИВТАНТЕРМО, NASA и т.д.) новой информацией о различных веществах требует использования функций, соответствующих формату конкретной базы данных [2].

Разработана компьютерная программа, в основе которой лежит комбинирование алгоритмов аппроксимации для анализа экспериментально полученных данных по теплоёмкости и приращениям энтальпии веществ в конденсированной фазе. Объединение всех этапов обработки предоставляет возможность более полного анализа доступной информации разных типов. Программа имеет понятный пользовательский интерфейс и существует как в виде отдельного приложения, так и веб-приложения (с ограниченным функционалом). Приращения энтальпии аппроксимируются полиномом выбранной степени, который может быть использован для исследования зависимости теплоёмкости от температуры. В случае, если пользователь располагает данными по высокотемпературной теплоёмкости, они могут быть приближены комбинацией выбранных пользователем элементарных функций. Результаты могут быть экспортированы в форматы баз данных.

1. I. Roslyakova, B. Sundman, H. Dette, et al // Calphad 55 (2016) 165

2. G.V. Belov, N.M. Aristova, I.V. Morozov, M.A. Sineva. // J. Math. Chem. 55 (2017) 1683

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АЗИДОНИТРО
СОЕДИНЕНИЙ. ЭНЕРГИИ ПЕРЕСТРОЙКИ РАДИКАЛОВ**

*Пащенко Л.Л.,¹ Мирошниченко Е.А.*²*

¹МГУ, Москва, Россия, ²ИХФ РАН, Москва, Россия

**eamir02@mail.ru*

Азидная группа является наиболее энергонасыщенной среди эксплозифорных групп, используемых при создании энергетических материалов: компонентов взрывчатых веществ и ракетных топлив. Однако, для этой группы до настоящего времени слабо изучены интермедиаты, энергетические характеристики энергий диссоциации связей, D, и средних термохимических энергий связей, в том числе, энергия перестройки фрагментов молекулы в радикалы. Нитропроизводные ароматических радикалов являются промежуточными соединениями реакций синтеза и превращения для различных нитроароматических соединений. По величинам их средних термохимических энергий связей и энергиям перестройки их радикалов также полностью отсутствуют литературные данные. Поэтому

в работе также были определены соответствующие величины СТЭС и энергии перестройки радикалов с известными энтальпиями образования. Для решения поставленных задач измерены энтальпии сгорания и парообразования таких соединений. Энтальпии образования нитроароматических радикалов приняты на основе анализа современных справочных данных.

На основе уравнений химической физики, связывающих энтальпии образования соединений, энтальпии атомизации и энергии диссоциации связей, были определены энергии перестройки радикалов и СТЭС. Для определения данных для азидов решены совместно уравнения для фенилазида и азобензола. Энергия перестройки азидного радикала, полученная нами, равна нулю.

Полученные нами данные по энергиям перестройки азидонитро радикалов и энергиям диссоциации связей необходимы для технологических расчетов кинетики реакций с участием азидонитро содержащих веществ.

МЕТОДЫ И ПРИБОРЫ ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭНЕРГИИ И НАТЯЖЕНИЯ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Таова Т.М., Хожонов Х.Б., Шебзухова И.Г., Алчагиров Б.Б.*

КБГУ, Нальчик, Россия

**khh180532@mail.ru*

Одними из важных свойств поверхности раздела фаз являются поверхностные энергия и натяжение, адсорбция компонентов, строение и элементный состав поверхностного слоя и др. Разработаны оригинальные экспериментальные и теоретические методы определения строения и свойств межфазных границ в конденсированных средах. Особое внимание уделяется исследованиям удельной свободной поверхностной энергии (f_{ω}) и поверхностного натяжения (σ) границ раздела фаз гетерогенных систем, которые необходимы при изучении протекающих на межфазных границах процессов, таких как спекание и залечивание поверхностных дефектов твёрдых тел, гетерогенный катализ и модифицирование металлов и сплавов, пайка и сварка разнородных материалов, образование и рост новой фазы, создание композиционных материалов и т.д.

Экспериментальное определение f_{ω} и σ твёрдых тел представляет трудную задачу. Анализ содержания большого числа экспериментальных методов определения f_{ω} и σ поверхностей твёрдых тел, описанных в литературе, показал, что достоверность получаемых результатов в большинстве работ низка; погрешности данных 10–50 %.

В данной работе приводится описание разработанных новых методов, позволяющих определять f_{ω} и σ твёрдых тел и их двойных сплавов с высокой точностью. Наиболее перспективным для измерения ПН металлов и сплавов в твёрдом состоянии оказался разработанный в КБГУ компенсационный метод нулевой ползучести (КМНП). На базе КМНП разработаны схемы и собраны специальные приборы и получены более 10 авторских свидетельств и патентов. С помощью этого метода определены ПН и их температурные коэффициенты для 22 металлов и 4-х сплавов бинарных систем In-Pb, Sn-Pb, In-Tl и Tl-Pb во всем концентрационном интервале. Погрешность измерения ПН составила около 2 %. Отметим, что обнаружена взаимная поверхностная активность компонентов в бинарных системах In-Pb и In-Tl.

Авторы считают, что в области физики межфазных явлений (ФМЯ) актуальной задачей остается разработка новых и более совершенных методов измерения поверхностной энергии и поверхностного натяжения металлов и сплавов в твердом состоянии.

ЭНЕРГИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИЛ В ЖИДКИХ ГАЛОГЕНАЛКАНАХ И ИХ БИНАРНЫХ СМЕСЯХ

Неручев Ю.А., Коротковский В.И., Рышкова О.С.*

Курский гос. ун-т., Курск, Россия

**yuan2003@mail.ru*

Проведены измерения скорости звука (0,1%), плотности (0,05%) и изобарной теплоемкости (2%) жидких галогеналканов и их бинарных смесей в интервале температур (25 – 150) °С. Рассчитана энергия межмолекулярных сил в жидких галогеналканах и их бинарных смесях по данным об их теплофизических свойствах.

Показано, что в указанных соединениях помимо дисперсионных сил притяжения ($m = 6$) и сил отталкивания ($n = 12$) проявляют себя дальнедействующие силы связи, вызывающие димерную ассоциацию частиц. Величина энергии межмолекулярных сил определяется соотношением:

$$|E_p| = B\rho^2 + b\rho^{1/3} \left(1 - \left(\frac{\rho}{\rho_b} \right)^{11/3} \right),$$

в котором B – константа дисперсионных сил, b – константа сил связи, определяемые критическими параметрами веществ, ρ – плотность жидкости, а ρ_b – плотность при нормальной температуре кипения. Выражение в скобках учитывает вклад энергии сил отталкивания.

В рамках механизма атом-атомного взаимодействия получена формула для прогнозирования величины константы дисперсионных сил по данным об индивидуальных свойствах атомных центров:

$$B = B_0 \left(\frac{(1 - \chi)\mu_l + \frac{l+1}{n+1}\chi\mu_n}{\mu_l} \right)^3 (\xi^2 + (1 - \xi)^2 a + 2\xi(1 - \xi)\sqrt{a}).$$

Здесь n – номер n -алкана, l – номер n -алкила, присутствующего в смеси, χ – весовая концентрация n -алкила, ξ – величина, характеризующая концентрацию атомов водорода в смеси.

Работа поддержана грантом РФФИ N 16-08-01203.

1. Korotkovskii V.I. , Ryshkova O.S. , Neruchev Yu.A. , Goncharov A.L., Postnikov E.B. Isobaric Heat Capacity, Isothermal Compressibility and Fluctuational Properties of 1-Bromoalkanes // Int .J. Thermophys. 2016. V. 37:58.
2. Ryshkova O.S. , Bolotnikov M.F., Korotkovskiy V.I. , Neruchev Yu.A. Peculiarities of temperature dependence of liquid 1-chloroalkane viscosity // High Temperatures. 2016. V. 54. P. 872.

**ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ СОЕДИНЕНИЙ В СИСТЕМАХ
ПРОЗРАЧНЫХ ПРОВОДЯЩИХ ОКСИДОВ НА ОСНОВЕ ZnO ПО
ДАННЫМ КНУДСЕНОВСКОЙ ЭФФУЗИОННОЙ
МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ**

Грибченкова Н.А., Смирнов А.С., Алиханян А.С.*

ИОНХ РАН, Москва, Россия

**gribchenkova@igic.ras.ru*

Эффузионным методом Кнудсена в сочетании с масс-спектральным анализом газовой фазы была исследована термодинамика парообразования трех квази-бинарных систем прозрачных проводящих оксидов оксидов галлия, индия и олова с общим летучим компонентом ZnO.

Индивидуальные фазы смешанных оксидов $ZnGa_2O_4$, $Zn_7In_2O_{10}$, $Zn_5In_2O_8$, Zn_2SnO_4 , также как и гетерогенные образцы систем были исследованы при температурах от 1360 до 1460 К. Данные системы проявляют инконгруэнтный характер парообразования. Было установлено, что пар над исследуемыми образцами систем содержит практически только продукты испарения ZnO — $Zn(g)$ и O_2 . На основании изотермических эффузионных экспериментов были определены парциальные давления компонентов газовой фазы, а также построено принципиальное р-х-сечения фазовых диаграмм систем. Энергетические характеристики сублимации и образования смешанных оксидов, включая стандартные энтальпии образования, были получены с помощью расчетов по третьему закону термодинамики.

Исследование поддержано грантом Президиума Российской Академии Наук (I.14P1).

**К АНАЛИТИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
ИЗОТЕРМ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ БИНАРНЫХ
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ, КОМПОНЕНТЫ КОТОРЫХ ОБРАЗУЮТ
УСТОЙЧИВЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ**

*Калажиков Х.Х., Калажиков Х.Х., Шериева Э.Х.**

КБГУ, Нальчик, Россия

**z-kalazh@yandex.ru*

Анализ имеющихся в литературе экспериментальных изотерм ПН металлических систем показывает, что их можно разделить на две большие группы:

1. Изотермы ПН с монотонным изменением ПН в зависимости от состава (их около половины из имеющихся).

2. Изотермы с некоторыми особенностями на кривых — с изломами, экстремумами, точками перегибов и т.д. Эти изотермы имеют сложный вид. Основная причина появления особенностей на изотермах ПН — появление в системе капиллярно-активных молекулярных образований типа A_nB_m , устойчивых при температуре измерения ПН.

В работе показано, что из изотерм первой группы можно выделить четыре типа простейших изотерм ПН, которые описываются уравнением, предложенным в [1]. При этом допускаемая этим уравнением среднее отклонение расчетных ПН от экспериментальных — около 1 %.

В работе также сделан анализ изотерм второй группы ПН. Установлено, что сложную систему А-В с особенностями можно представить в виде комбинаций простых систем первой группы изотерм ПН. Такой подход позволяет описать сложные изотермы ПН бинарных систем уравнением [1] вполне удовлетворительно. Подробно рассмотрены методики расчетов изотерм ПН бинарных систем с одним и с двумя устойчивыми химическими соединениями.

ми. В работе впервые показано роль молекулярных образований A_nB_m в формировании поверхностных свойств сплавов бинарных систем.

1. Калажиков Замир Х., Зихова К.В., Калажиков З.Х., Калажиков Х.Х., Таова Т.М. Расчет изотерм поверхностного натяжения расплавов многокомпонентных металлических систем. // ТВТ. - 2012. - Т.50 №3. - С.469-472.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПРОИЗВОДСТВА ЭНТРОПИИ ОТ СКОРОСТИ ИЗМЕНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

Костановский А.В., Костановская М.Е.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**kostanovskiy@gmail.com*

В работе представлены результаты обработки экспериментальных термограмм $T(\tau)$ образцов вольфрама, находящегося в твердой фазе, которые были получены: в процессе самопроизвольного охлаждения сферы (метод электростатической левитации) или нагрева тонкой пластины постоянным электрическим током (при разрядке батареи), или нагрева пластины лазерным потоком излучения. Скорость изменения температуры $dT/d\tau$ варьируется в диапазоне $10 \div 9 \cdot 10^7$ К/с. Проведен сравнительный анализ отношения плотности теплового потока к произведению скорости изменения теплового потока и времени релаксации теплового потока $\tau = 10^{-12} - 10^{-10}$ сек. Анализ показал, что во всех экспериментах реализуется параболическое уравнение теплопроводности, отвечающее линейному режиму термодинамики. Плотность производства энтропии p рассчитывается на основе формулы, которая выведена в предположении постоянного значения изобарной теплоемкости. При расчете плотности производства энтропии данное предположение выполняется в результате использования малых значений изменения температуры. Правомерность использования предложенной формулы для расчета плотности производства энтропии обоснована выполнением принципа экстремума для зависимости $p = f(\tau)$ при стремлении системы к равновесному состоянию. Показано, что плотность производства энтропии, рассчитанная на основе четырех экспериментальных термограмм, имеет единую линейную зависимость от скорости изменения температуры. Данный результат позволяет предположить, что линейная зависимость $p = f(dT/d\tau)$ может рассматриваться в качестве универсальной зависимости для линейного режима термодинамики.

АВ-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СВЕРХВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ta_xZr_{1-x}C$

Сиднов К.П.,^{1,2} Воротыло С.А.¹*

¹МИСиС, Москва, Россия, ²ИСМАН, Черногоровка, Россия

**sidnov@list.ru*

Благодаря высокой температуре плавления, стойкости к высокотемпературному окислению и высоким механическим свойствам твердые растворы $Ta_xZr_{1-x}C$ являются перспективными карбидами для применения в качестве сверхвысокотемпературных керамических материалов (СВТК).

Отсутствие достоверных данных о фазовом равновесии в системе Ta-Zr-C препятствует разработке и внедрению соответствующих СВТК. В частности, в литературе имеются

противоречивые данные о существовании разрыва области смешиваемости в системе Ta-Zr-C при температурах ниже 900 °С [1–3] .

В ходе выполнения данной работы был проведен расчет термодинамических свойств сплавов $Ta_xZr_{1-x}C$ и показано, что распад твердых растворов на монокарбиды (TaC и ZrC) не должен происходить.

Среди различных методов, позволяющих синтезировать твердые растворы в системе Ta-Zr-C, одним из наиболее перспективных считается самораспространяющийся высокотемпературный синтез [4, 5]. С помощью данного метода были синтезированы однофазные образцы составов $Ta_xZr_{1-x}C$ ($x=0.9, 0.8, 0.6, 0.3$) и был проведен отжиг в течение 40 часов. По результатам исследований не было выявлено признаков разложения твердого раствора при отжиге, что подтверждает выводы, полученные при теоретическом моделировании.

1. E.I. Gladyshevsky, T.F. Fedorov, L.V. Gorshkova. The zirconium–tantalum–carbon system. Russ. J. Inorg. Chem. 9 (1964), 639–642.
2. A.I. Gusev, Order-Disorder Transformations and Phase Equilibria in Strongly Nonstoichiometric Compounds, Phys.-Uspekhi, 43(1) (2000), 1-37.
3. P. Zhou, Y. Peng, Y. Du, S. Wang, G. Wen, W. Xie, K. Chang, A thermodynamic description of the C–Ta–Zr system. Int. J. Refract. Met. Hard Mater. 41 (2013), 408-415.
4. A.S. Rogachev, A.S. Mukasyan, Combustion for Material Synthesis. CRC Press, Boca Raton, 2014.
5. Concise Encyclopedia of Combustion Synthesis: History, Theory, Technology, and Products (Eds. I. Borovinskaya, A. Gromov, Yu. Maksimov, A. Rogachev, E. Levashov, A. Mukasyan), Elsevier, Toronto, 2017.

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРОВ

*Сафаров М.М.,^{*1} Хубатхузин А.А.,² Файзиев Б.Г.,³ Саидзода К.Б.³*

¹ФМГУ им. М.В. Ломоносова, Душанбе, Таджикистан, ²КНИТУ-КХТУ, Казань, Россия, ³ТГПУ им. С. Айни, Душанбе, Таджикистан

**mahmad1@list.ru*

Теплопроводность тел относится к явлениям переноса и описывается в молекулярной физике. При теплопроводности происходит перенос энергии из одной точки тела в другую. Это происходит лишь в том случае, когда различные точки тела имеют различную температуру, и происходит до тех пор, пока температура во всех точках не сравняется. Физика этого процесса заключена в хаотическом движении и соударениях молекул вещества, из которого состоит тело. Для стационарного состояния вещества решение задачи теплопроводности сравнительно просто. Температура точек тела в стационарном состоянии не меняется со временем и является только функцией координат. Если изменение температуры тела происходит по направлению одной координатной оси (например X), то в теле всегда можно найти множество точек, имеющих одинаковую температуру. Поверхность, проходящая через такие точки называется изотермической. Для исследования теплопроводности веществ также используются стационарный (метод регулярного теплового режима первого и второго рода) и нестационарный (метод зонда и метод двух точек) методы. Теория определения теплопроводности предложена профессором Г.М. Кондратьевым. На основе предложенного профессором Кондратьевым Г.М. и профессором Голубьевым И.Ф. метода для измерения теплопроводности жидкостей при различных температурах и давлениях был разработан цилиндрический бикалориметр регулярного теплового режима первого рода, который в дальнейшем успешно использовали профессора Абас-заде, Гусейновым, Маджидовым, Сафаровым и их учениками. Для исследования теплопроводности твердых

тел в виде пластин профессор Платунов Е.С. и его ученики создали и разработали экспериментальную установку, работающую методом монотонного разогрева [1]. На основе данного метода для измерения теплопроводности жидкостей при различных температурах и давлениях профессор Мустафаев Р.А. разработал экспериментальную установку, при помощи которой была исследована теплопроводность кислородосодержащих органических жидкостей. На основе теории стационарной теплопроводности для исследования коэффициента теплопроводности композиционных полимерных материалов нами разработана установка и измерена их теплопроводность в диапазоне температур (293-368)К.

-
1. Сафаров М.М. Теплофизические свойства простых эфиров и водных растворов гидразина в зависимости от температуры и давления. Дис. д-ра т.н., Душанбе, 1993.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕРОГО И БЕЛОГО ОЛОВА

*Сыздыкова А.Б.,^{*1} Белов М.П.,¹ Абрикосов И.А.²*

¹*ММДЛ НИТУ МИСиС, Москва, Россия,* ²*LiU, Линчепинг, Швеция*

**syzdykova.aygerym@gmail.com*

Олово обычно встречается в одной из двух аллотропных форм: стабильная низкотемпературная альфа фаза или серое олово, представляет собой полупроводник с узкой запрещенной зоной, имеющий структуру алмаза; при повышении температуры выше $T \sim 13$ °С, кристалл превращается в бета-фазу или белое олово, которое представляет собой металл с объемно-центрированной тетрагональной решеткой [1].

Информация об энтальпии альфа \rightarrow бета фазового превращения в олове отсутствует и имеется широкий разброс в доступных результатах, которые не очень хорошо согласуются между собой [2], [3].

В этой работе мы вычисляем механические и термодинамические свойства: равновесные параметры решетки, объемный модуль, энтропию и энтальпию преобразования, свободную энергию Гиббса.

-
1. Pavone P., Baroni S., Gironcoli S. // Phys.Rev.B. 1998. V. 57. No. 17.
 2. Hultgren R., Desai P.D., Hawkins D.T., Gleiser M., Kelley K.K., Wagman D.D. // American Society For Metals, Metals Park, Ohio. 1973.
 3. Cohen E., van Eijk C. // Phys. Chem. 1899. V. 30. P. 601-622.

ПОВЕДЕНИЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛУПРОВОДНИКА GeTe В СЕГНЕТО- И ПАРАФАЗНОМ СОСТОЯНИИ

*Собиров Д.Ф.,^{*1} Сафаров М.М.²*

¹*КТГУ, им. Н. Хусрава, Курган-Тюбе, Таджикистан,* ²*ФМГУ им. М.В. Ломоносова, Душанбе, Таджикистан*

**mahmad1@list.ru*

Экспериментальное измерение теплоемкости для разных интервалов температур является основным методом определения термодинамических свойств веществ.

Исследование удельной теплоемкости C_p полупроводника теллурида германия в широком интервале температур от комнатной до 800 К проводилось с помощью дифференциального сканирующего калориметра (ДСК) динамическим методом. Все экспериментальные данные выполнены на базе специализированного управляющего вычислительного комплекса с использованием ЭВМ.

Для расчета температурной зависимости энтальпии, энтропии и энергии Гиббса кристалла теллурида германия использовались интегральные выражения от удельной теплоемкости.

Установлено, что с ростом температуры в сегнетофазе значения удельной теплоемкости C_p , энтальпии ($\Delta H > 0$) и энтропии ($\Delta S > 0$) кристалла теллурида германия увеличиваются, а вблизи точки Кюри T_c наблюдается аномальный (резкий) рост C_p и значительное уменьшение энергии Гиббса ($G(T) < 0$). В параэлектрическом состоянии ($T \geq T_c$) изменение этих величин ведёт себя иначе (т. е. наоборот): с ростом температуры значения теплоемкости C_p , энтальпии ($\Delta H < 0$) и энтропии ($\Delta S < 0$) кристалла теллурида германия уменьшается, а энергия Гиббса ($G(T) > 0$) экспоненциально увеличивается, т. е. в начале парафазы до 681 К резко увеличивается $G(T)$, но с отдалением от точки Кюри > 681 К в пределах погрешности опыта остаётся постоянным.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЛАВОВ БИНАРНЫХ СИСТЕМ Sn-Pb И In-Pb МЕТОДОМ РФЭС

Калажиков З.Х., Дзугурова Л.Х., Жанимова Д.А., Карамурзов Б.С.,
Калажиков Х.Х.*

КБГУ, Нальчик, Россия

**z-kalazh@yandex.ru*

В настоящем сообщении представлены результаты исследований поверхностей сплавов Sn+8,96 ат. % Pb и In+51 ат. % Pb методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС, системы K-Alpha, Великобритания) при комнатной температуре на приборе, имеющимся в Кабардино-Балкарском госуниверситете. Из полученных результатов видно, на спектрах наблюдаются дублеты фотоэлектронных пиков основных уровней олова и свинца ($Sn3d$ и $Pb4f$, $In3d$) поверхность образца до травления характеризуется наличием соединений основных компонентов сплава с кислородом. Наблюдаются компоненты углеводородных загрязнений, что подтверждается заметными пиками $O1s$ и $C1s$ на спектре, снятом до ионного травления. Таким образом, олово на поверхности сплавов системы $Sn - Pb$ находится преимущественно в окисленном состоянии в виде диоксида олова SnO_2 (486,1 эВ). Но и значительная часть олова остается в металлическом состоянии (484,5 эВ). Индий также находится на поверхности сплавов системы $In - Pb$ в виде InO . Эти результаты подтверждаются значениями параметра Вагнера. Если сравнивать эти результаты с результатами по свинцу, то можно заметить, что почти весь свинец находится на поверхности в металлическом, неокисленном, состоянии. Корректировка зарядового смещения энергии связи по линии $C1s$ приводит к энергии связи основного пика $Pb4f_{7/2}$ равному 137,2 эВ, что хорошо согласуется с литературными данными. Методами ионного травления поверхности сплава и РФЭС нами построены профили распределения компонентов в бинарных сплавах Sn+8,96 ат. % Pb и In+51 ат. % Pb. Из полученных данных для обоих сплавов видно, что свинец адсорбируется положительно, что согласуется с положением термодинамики о поверхностной активности компонента в бинарных металлических системах: компонент с меньшим ПН является более поверхностно-активным.

1. Покровский Н.Л., Пугачевич П.П., Голубев Н.А. Исследование поверхностного натяжения системы In-Pb. // ДАН СССР. 1968, №1. С.80-83.
2. Demeri M., Farag M., Heasley T.. Surface tension of liquid Pb-Sn alloys. - J. Mater // Sci.. 1974, v9. №4. p/683-685

СТЕКЛООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ И ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ Al-Ni-Co-Nd(Sm)

*Русанов Б.А.,¹ Сидоров В.Е.,¹ Мороз А.И.,*¹ Швец П.,² Яничкович Д.²*

¹УрГПУ, Екатеринбург, Россия, ²ИФ САН, Братислава, Словакия

**nastmoroz97@yandex.ru*

Аморфные ленты на основе алюминия с 3d-переходными металлами (ПМ) и редкоземельными металлами (РЗМ) активно изучаются благодаря их уникальным физическим свойствам. Они обладают целым набором таких свойств: высокая коррозионная стойкость, пластичность и прочность. Однако их низкая стеклообразующая способность ограничивает их промышленное применение.

В нашей работе мы исследовали влияние Nd и Sm на стеклообразующую способность сплавов Al-Ni-Co-РЗМ.

Аморфные ленты, были получены из сплавов $Al_{86}Ni_4Co_4Nd(Sm)_6$ и $Al_{86}Ni_6Co_2Nd(Sm)_6$ методом спиннингования.

Рентгеноструктурные исследования показали, что ленты полностью аморфны. Кинетика кристаллизации была изучена методом ДСК на установке Perkin Elmer, а электрическое сопротивление было измерено стандартным четырехзондовым методом.

На основе полученных данных исследований рассчитаны наиболее популярные критерии стеклообразующей способности, определены температуры тепловых процессов, которые сопровождают процесс кристаллизации, а также рассчитаны энергии активации методом Киссинджера.

Изученные ленты, в отличие от лент, полученных на основе тройных систем содержащих только Ni или Co, имеют выраженную точку стеклования, что не характерно для аморфных сплавов на основе алюминия. Кроме того, замена 8 ат.% Ni на 6 ат.% Ni и 2 ат.% Co увеличивает температуру существования аморфной фазы почти на 30 К, а дальнейшее увеличение содержания кобальта до 4 ат.% на 80 К. Процесс кристаллизации при измерении сопротивления сопровождается 3 фазовыми переходами первого рода.

Анализ результатов показал, что использование Nd и Sm в сплавах Al-Ni-Co-РЗМ является очень перспективным с точки зрения повышения области существования аморфной фазы.

ИЗОТЕРМИЧЕСКАЯ СЖИМАЕМОСТЬ БИНАРНЫХ РАСПЛАВЛЕННЫХ СМЕСЕЙ ГАЛОГЕНИДОВ КАЛИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*Татаринев А.С.,¹ Кобелев М.А.,*² Степанов В.П.²*

¹УрФУ, Екатеринбург, Россия, ²ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**coulomb76@mail.ru*

Методом классической молекулярной динамики проведён расчёт изотермической сжимаемости бинарных расплавленных галогенидов калия (KBr-KI, KCl-KI, KF-KI) во всей области концентраций при температуре 1200К. Базовая кубическая ячейка, содержащая 3456 частиц, моделировалась в NVT-ансамбле при наложении периодических граничных условий. Взаимодействие частиц в ячейке описывалось парным потенциалом типа Борна-Майера-Хаггинса в приближении Фуми-Тоси. Кулоновское взаимодействие учитывалось по методу Эвальда. Объём базовой ячейки для бинарных смесей рассчитывался из данных по плотности индивидуальных солей в приближении аддитивности мольных объёмов чистых компонентов.

В данной работе изотермическая сжимаемость рассчитывалась по стандартному термодинамическому соотношению через длинноволновой предел структурного фактора типа плотность-плотность.

Результаты моделирования показывают, что в рамках описания бинарных расплавленных смесей посредством модели жёстких ионов удаётся воспроизвести наблюдаемые в эксперименте закономерности изменения изотермической сжимаемости в зависимости от концентрации. А именно, увеличение положительных отклонений изотермической сжимаемости от аддитивности при замене аниона второго компонента в ряду Br – Cl – F.

Анализ структурных характеристик смесей в зависимости от концентрации компонентов демонстрирует, что в системе KF-KI при добавлении фторид-иона существенно меняется локальное окружение катиона калия. В объёме бинарной расплавленной смеси KF-KI формируются области преимущественно содержащие катион-анионные группировки, соответствующие индивидуальным компонентам. В противоположность этому в бинарных смесях KBr-KI и KCl-KI наблюдается закономерное изменение состава ближайшего катион-анионного окружения при добавлении второго компонента.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАНСУЛЬФОНАТОВ НАТРИЯ И КАЛИЯ

Сулимов А.В., Косова Д.А, Дружинина А.И., Тифлова Л.А.*

МГУ, Москва, Россия

**sulimov.art@gmail.com*

Изучение свойств солей метансульфоновой кислоты и систем на их основе представляет интерес, в первую очередь, с точки зрения фундаментальных исследований, так как информация о свойствах этих солей в литературе представлена фрагментарно, несмотря на то, что метансульфоновая кислота и ее неорганические производные находят применение в различных областях. С практической точки зрения исследование свойств метансульфонатов натрия и калия интересно для решения задач геохимии. Метансульфоновая кислота является продуктом окисления диметилсульфида кислородом воздуха, который, в свою очередь, представляет собой продукт жизнедеятельности фитопланктона. Не так давно были обнаружены метансульфонаты натрия и калия в кернах льда Антарктики. Знание свойств и состава ледяных кернов может быть применено для воссоздания климатических изменений и состава мирового океана в течение формирования породы, то есть для решения задач геотермобарометрии. Целью настоящей работы стало изучение термодинамических свойств солей метансульфоновой кислоты — $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{ONa}$ и $\text{CH}_3\text{SO}_2\text{OK}$.

В ходе работы было проведено измерение изобарных теплоемкостей солей методом ДСК в широком интервале температур. Методом калориметрии растворения определен тепловой эффект растворения солей в воде при 298,15 К. На основании экспериментальных данных рассчитаны температурные зависимости термодинамических функций солей в программе CpFit (<http://td.chem.msu.ru/develop/cpfit/>) - изобарная теплоемкость, энтропия, энтальпия. При аппроксимации использовалась линейная комбинация функций Эйнштейна-Планка. Из данных калориметрии растворения рассчитаны стандартные энтальпии образования солей при 298,15 К.

-
1. Gernon M. D., Wu M. Buzsta, T. Janney. *Environmental Benefits of Methanesulfonic Acid. Comparative Properties and Advantages*. Green Chemistry, 1999, 1.
 2. Baker S. C., Kelly D. P., Murrell J. C. *Microbial Degradation of Methanesulphonic Acid: A Missing Link in the Biogeochemical Sulphur Cycle*. Nature, 1991, 350.

3. Hatakeyama S., Okuda M., Akimoto H. *Formation of Sulfur Dioxide and Methanesulfonic Acid in the Photooxidation of Dimethyl Sulfide in the Air*. Geophysical Research Letters, 1982, 9.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ ИОНОВ КАДМИЯ И БАРИЯ В ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДЕ ПРИ 298,15 К

Рахманова П.А.,¹ *Василёв В.А.*,¹ *Соловьёв С.Н.*,¹ *Новиков А.Н.*,*²
Доронин Я.И.,² *Скорба В.Р.*²

¹*РХТУ имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия,* ²*НИ РХТУ имени Д.И. Менделеева,*
Новомосковск, Россия

**anngic@yandex.ru*

Теплоемкость отражает энергетические и структурные изменения, происходящие при образовании растворов, а рассчитанные на ее основе термодинамические характеристики ионов позволяют оценить влияние эффектов сольватации на физико-химические свойства различных жидких систем. В настоящей работе были впервые с высокой точностью экспериментально исследована теплоемкость растворов иодидов бария и кадмия в диметилсульфоксиде ДМСО. Исследования теплоемкости растворов проводили в герметичном калориметре с изотермической оболочкой и платиновым термометром, сопротивление которого определяли при помощи мостовой схемы. Погрешность измерения теплоемкости составляла 0.001 Дж/(г К). На основании экспериментальных данных были вычислены кажущиеся мольные теплоемкости Φ_c иодидов бария и кадмия в ДМСО. Для нахождения стандартных парциальных мольных величин, соответствующих состоянию бесконечно разбавленного раствора, концентрационные зависимости Φ_c аппроксимированы уравнением линейной регрессии. Разделение этих величин на ионные составляющие проводили исходя из условия аддитивности и литературных данных о стандартном значении теплоемкости иодид-иона в ДМСО. Стандартные значения теплоемкости ионов бария и кадмия в ДМСО составили, соответственно, 133 и 126 Дж/(моль К). Величина стандартной парциальной мольной теплоемкости может быть представлена в виде суммы вкладов обусловленных собственной теплоемкостью иона в растворе и изменениями теплоемкости растворителя вследствие процессов сольватации, реорганизации первичной структуры и специфических взаимодействий с ионами. Последний вклад характерен только для ионно-комплексобразователей, в частности для иона кадмия. Однако, при одинаковом заряде размеры ионов бария и кадмия существенно различаются, поэтому все остальные составляющие этих величин для данных ионов также различны и сопоставление значений позволяет, на наш взгляд, только качественно оценить вклад специфических взаимодействий иона кадмия с молекулами ДМСО. Как и в растворах N-метилпирролидона, специфические взаимодействия иона кадмия с молекулами растворителя не приводят к заметному изменению теплоемкости.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВОДНОЙ ЭМУЛЬСИИ ОЛЕИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Аетов А. У.,* *Зарипов З. И.*, *Усманов Р. А.*, *Накипов Р. Р.*

ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия

**aetovalmaz@mail.ru*

Технология окисления, реализуемая в сверхкритической водной среде (СКВО), является одним из экологически чистых способов переработки промышленных и бытовых отходов [1-2]. Исследованию химических реакций, осуществляемых в СКФ средах, уделяется

значительное внимание [3-5]. В рамках этого направления проведены экспериментальные исследования и представлены результаты некоторых термодинамических свойств водных растворов жирной (олеиновой) кислоты, входящего в состав сточных вод пищевой промышленности: коэффициента теплового расширения и плотности в интервале температур 298÷363 К и давлений 0,098÷49,0 МПа, изобарной теплоемкости при температурах 320К÷570 К и давлениях 9,8÷29,4 МПа без и в присутствии пероксида водорода. В присутствии пероксида водорода установлен отрицательный тепловой эффект, величина которого увеличивается с ростом давления от 70 кДж/кг до 100 кДж/кг.

1. Marrone Ph. A., Hong G. T., Spritzer M. H. // J. Adv. Oxid. Technol. 2007. Vol. 10. No. 1. 157-168p.
2. Аникеев В. И. Ермакова А.А. // Журн. прикл. химии. 2011. Т. 84. 88-94.
3. Gumerov F.M., Kayumov R.A., Usmanov R.A., Sagdeev A.A., Abdullin I.Sh., Sharafeev R.F. // American J. Anal. Chem. 2012, Vol. 3. 950-957p.
4. Востриков А.А., Дубов Д.Ю., Псаров С.А. // Известия АН (Сер, хим.). 2001. С. 1409-1412.
5. Gayazova E.S., Usmanov R.A., Gumerov F.M., Friedland S.V., Zaripov Z.I., Gabitov F.R., Musin R.Z. // International Journal of Analytical Mass Spectrometry and Chromatography. 2013. 48-54p.

УЛУЧШЕННЫЕ СОСТАВЫ ДЛЯ ЭНДОПРОТЕЗИРОВАНИЯ

*Андрусова Н.Н.,^{*1} Жаворонок Е.С.,¹ Легонькова О.А.,² Кедик С.А.¹*

¹МГУ (ИТХТ им М.В. Ломоносова), Москва, Россия, ²НМИЦХ им. А.В. Вишневого, Москва, Россия

**nrychneva@mail.ru*

Эндопротезирование представляет собой хирургическую операцию, в результате которой поврежденный сустав удаляется и заменяется эндопротезом. В настоящее время наиболее перспективным методом фиксации частей эндопротезов является бесцементный метод, при котором части протеза имеют пористую поверхность, состоящую из гидроксипатита. Это позволяет кости впоследствии врастать в имплант. Для улучшения существующих эндопротезов данного типа предлагается вводить в них биосовместимые полимеры, которые продлят срок службы эндопротезов и увеличат их механическую прочность.

В качестве объектов исследования выбраны растворы биосовместимого полимера - ацетата целлюлозы марки OPADRY CA 500F190001 производства компании Colorcon в биосовместимых растворителях – N-метилпирролидоне и диметилсульфоксиде. В ходе работы проводились реовискозиметрические исследования этих растворов в диапазоне концентраций от 90 до 230 г/л и диапазоне температур от 15 до 45°С. Эксперименты проводились на ротационном вискозиметре Брукфильда DV2TLV с рабочим узлом типа системы коаксиальных цилиндров.

В результате эксперимента были получены кривые течения и вязкостно-скоростные кривые исследуемых растворов. Их вид свидетельствует о том, что все объекты проявляют ньютоновское поведение, что дает возможность охарактеризовать их величиной ньютоновской вязкости. Температурные зависимости этой вязкости подчиняются закону Аррениуса-Френкеля-Эйринга, что дает возможность рассчитать энергию активации вязкого течения. Для растворов в N-метилпирролидоне она составляет от 30 до 35 кДж/моль, а для растворов в диметилсульфоксиде — от 20 до 35 кДж/моль. Концентрационные зависимости энергии активации вязкого течения показывают, что она слабо зависит от концентрации с небольшой тенденцией к ее увеличению с ростом концентрации. Построены концентрационные зависимости вязкости, которые можно аппроксимировать двумя прямыми, образующими излом в случае растворов в диметилсульфоксиде при концентрации 170 г/л, а в случае N-метилпирролидона — при 165 г/л. Таким образом, определена

оптимальная концентрация для дальнейшего диспергирования гидроксиапатита в этих растворах.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ (Er, In)-ЗАМЕЩЕННОГО ЦЕРАТА БАРИЯ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 200-700 К

*Мацкевич Н.И.,*¹ Вольф Т.А.,² Самошкин Д.А.,³ Станкус С.В.,³ Вязовкин И.В.¹*

¹ИИХ СО РАН, Новосибирск, Россия, ²КИТ, Карлсруэ, Германия, ³ИТ СО РАН, Новосибирск-90, Россия

*nata.matskevich@yandex.ru

Цераты щелочноземельных элементов, в частности, замещенные цераты бария, являются перспективными материалами для использования в качестве пигментов, электролитов топливных элементов и др.

В настоящей работе представлена теплоемкость замещенного церата бария, имеющего состав $\text{BaCe}_{0.7}\text{Er}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{O}_{2.85}$.

Соединение $\text{BaCe}_{0.7}\text{Er}_{0.2}\text{In}_{0.1}\text{O}_{2.85}$ было получено методом твердофазного синтеза. Идентификация проведена рентгенофазовым анализом и флуоресцентной спектроскопией. Вещество представляло собой индивидуальную фазу с орторомбической структурой (пространственная группа $\text{Pm}\bar{c}n$).

Теплоемкость была измерена в интервале температур 200–700 К на калориметре DSC 404 F1 с использованием платинового тигля с корундовым вкладышем со скоростью 6 К/мин в проточной атмосфере аргона (20 мл/мин). В качестве калибровочного образца использовали сапфир.

Результаты экспериментальных измерений теплоемкости показали, что для исследуемого соединения в интервале температур 200–700 К отсутствуют фазовые переходы. Теплоемкость при стандартных условиях составляла: $C_p = 114.9 \pm 1.5$ Дж/(К моль). Ранее [1] мы измерили теплоемкость (Ho, In)-замещенного церата бария, где обнаружили фазовый переход второго рода при температуре 550 К.

Настоящая работа поддержана РФФИ № 16-08-00226, Карлсруэ институтом технологий и ФАНО России.

-
1. Matskevich N.I., Wolf Th., Le Tacon M., Adelman P., Stankus S.V., Samoshkin D.A., Tkachev E.N. // J. Therm. Anal. Calorim. 2017. V. 130. P. 1125.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАНСУЛЬФОНАТОВ МЕДИ И ЦИНКА

Косова Д.А., Сулимов А., Тифлова Л.А., Монаенкова А.С.*

МГУ, Москва, Россия

*dakosova@gmail.com

Метансульфоновая кислота ($\text{CH}_3\text{SO}_2\text{OH}$) является простейшим представителем ряда сульфокислот. Такие свойства, как относительно невысокая коррозионная активность, термическая стабильность, низкая токсичность и возможность биологического разложения, а также высокая растворимость солей позволяет использовать данную кислоту в качестве растворителя и реагента. Кроме того, метансульфоновая кислота является основным продуктом фотохимического окисления диметилсульфида в атмосфере и, соответственно,

звеном в биогеохимическом цикле серы в окружающей среде. Ввиду вышеперечисленных свойств, метансульфонаты переходных металлов представляют интерес как при получении покрытий различными вариациями гальванопластики, так и в качестве катализаторов. Также ввиду повышенной плотности растворов цинксодержащих солей метансульфонат цинка может использоваться в качестве жидкости глушения при бурении и ремонте нефтяных скважин.

Таким образом, целью работы стало изучение термодинамических свойств солей метансульфоновой кислоты. В качестве объектов исследования нами были выбраны $\text{Cu}(\text{SO}_3\text{CH}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Zn}(\text{SO}_3\text{CH}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$.

В ходе работы было проведено измерение изобарных теплоемкостей солей методом ДСК в широком интервале температур. Методом калориметрии растворения определен тепловой эффект растворения солей в воде при 298,15 К. На основании экспериментальных данных рассчитаны температурные зависимости термодинамических функции солей в программе CpFit (<http://td.chem.msu.ru/develop/cpfit/>) — изобарная теплоемкость, энтропия, энтальпия. При аппроксимации использовалась линейная комбинация функций Эйнштейна-Планка. Из данных калориметрии растворения рассчитаны стандартные энтальпии образования солей при 298,15 К.

ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛАВЛЕНИЯ ГАЛОГЕНИДОВ НАТРИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Закирьянов Д.О., Кобелев М.А., Ткачѐв Н.К.*

ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**dmitry.usu.ph@yandex.ru*

Методом молекулярной динамики проведено теоретическое исследование характеристик фазовых переходов плавления и кристаллизации в классических ионных системах. Рассмотрен аналог примитивной модели электролита, с одинаковыми радиусами и противоположными по знаку зарядами, с помощью которой возможно проследить роль борн-майеровского отталкивания на температуру, энтропию и скачок плотности при плавлении. Основное внимание будет сфокусировано на описании характеристик фазового перехода плавление–кристаллизация в зависимости от изменения параметров парного потенциала типа Борна–Майера. Процесс плавления базовой кристаллической ячейки, содержащей 512 частиц, моделируется при использовании NPT-ансамбля, с шагом 0,005 пс, общим количеством шагов равным $4 \cdot 10^6$, что по нашему мнению является достаточным для достижения равновесного состояния системы. Результаты моделирования показывают, что предэкспоненциальный фактор борновского отталкивания влияет только на плотность рассматриваемой системы, при этом температура фазового перехода остаётся постоянной, тогда как уменьшение характерной длины парного потенциала приводит к понижению температуры плавления модельной системы. Проведены оценки влияния вакансий на температуру плавления на примере галогенидов натрия. Предложенный теоретический подход к описанию фазового перехода жидкость–твёрдое тело применен к галогенидам натрия. В частности, для хлорида натрия, имеющему экспериментальную температуру плавления 1074 К, показано, что моделируемый кристалл перегревается примерно на 50 К выше температуры плавления. Рассчитанная температура и теплота плавления равны, соответственно, 1112 ± 12 К и 38,4 кДж/моль, а скачок плотности составил 0,44 г/см³. В докладе будет представлено сопоставление рассчитанных и экспериментальных характеристик плавления для всех галогенидов натрия.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-03-00606).

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY ON THERMODYNAMIC PROPERTIES INTERMETALLIC COMPOUNDS IN THE Zr-Fe BINARY SYSTEM

*Мухамедов Б.О.,*¹ Саенко И.С.,² Фабричная О.Б.,² Абрикосов И.А.³*

¹*МИСиС, Москва, Россия, ²TUFBA, Фрайберг, Германия, ³LiU, Линчепинг, Швеция*

**m_bobur_1991@mail.ru*

Zr-Fe system is the subject of great interest in modern industry of composite and structural steels. Composite materials based on TRIP (transformation-induced plasticity) matrix reinforced by zirconia ceramics are of particular interest due to the wide range of their possible technological, especially, in the nuclear industry and automotive production as structural and functional materials. Development of such composite materials requires the knowledge of thermodynamic properties and phase relations. Thus, the main purpose of this work is the experimental and theoretical study of the thermodynamic properties of the Zr₃Fe and ZrFe₂ compounds. Density functional theory (DFT) calculations in combination with the quasi-harmonic approximation have been used to determine the enthalpies of formation, standard entropies as well as isochoric and isobaric heat capacities (CV, CP) for the Zr₃Fe and ZrFe₂ compounds from 0 K up to high temperatures. Experimentally, the heat capacities of both compounds was been measured using differential scanning calorimetry (DSC) method. Heat capacity of the Zr₃Fe compound was measured for the first time in the range of temperatures between 100 K and 1023 K. Experimental data on the heat capacity of the ZrFe₂ were obtained in the wide temperature range from 100 K to 1473 K and compared with available literature data. By using the combination of theoretical and experimental data, the main thermodynamic properties of the Zr₃Fe and ZrFe₂ compounds were described from 0 K up to temperatures close to the upper limits of stability.

АНАЛИЗ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ ЖИРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КИСЛОТ

Овчинников В.В., Кулаков А.А., Мальцева С.А.*

КНИТУ-КАИ, Казань, Россия

**chem_vvo@mail.ru*

Известно, что жирные кислоты могут быть включены в структуру липидов. Жирные кислоты имеют одну или несколько С=C двойных связей. Такой тип кислот играет важную роль в пищевой и сталелитейной промышленности. По этой причине важно объединить их термодинамические данные по теплотам парообразования $\Delta_{vap}H^\circ$, сгорания $\Delta_c H^\circ$, образования $\Delta_f H^\circ$ и рассчитать на их основе уравнения, которые могут служить для предсказания свойств новых подобных жирных кислот. Анализ упомянутых выше термодинамических функций жирных кислот: додекановой ($C_{12}H_{24}O_2$), миристиновой ($C_{14}H_{28}O_2$), пальмитиновой ($C_{16}H_{32}O_2$), маргариновой ($C_{17}H_{34}O_2$), стеариновой ($C_{18}H_{36}O_2$) и арахидиновой ($C_{20}H_{40}O_2$), представлен в работах [1, 2] позволил рассчитать уравнения (1-3), в которых функция $\Delta_{vap}H^\circ$, $\Delta_c H^\circ$ или $\Delta_f H^\circ$ зависит от числа валентных электронов N без числа электронных пар g атомов кислорода (2 пары) в составе кислот.

$$\Delta_{vap}H^\circ = (27.1 \pm 17.9) + (1.4 \pm 0.2) (N-g); r 0.974 \text{ So } 7.3, (1)$$

$$\Delta_c H^\circ = (5.7 \pm 80.5) - (108.7 \pm 0.8) (N-g); r 0.999, \text{ So } 32.0 (2)$$

$$\Delta_f H^\circ = (-433.5 \pm 50.1) - (4.9 \pm 0.5) (N-g); r 0.977, \text{ So } 20.4 (3)$$

Параметры корреляции расчетных уравнений для жирных кислот, имеющих от 12 до 20 атомов углерода в их структурах, фактически равны тем же параметрам для простых углеводородных кислот [3], но имеют различные ошибки в коэффициентах корреляции.

1. N. Adriaanse, H. Dekker. Heats of combustion of normal saturated fatty acids and their methyl esters. // J. Coops, Rec. Trav. Chim. Pays/Bas, 1965, 84, 393.
2. R.M. Stephenson, S. Malanowski. Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. 1987.
3. Овчинников В.В. Термохимия гетероатомных соединений. Анализ и расчет термодинамических функций органических кислот // Вестник Казанского технол. ун-та, 2014,17, 144.

**КОМПЛЕКСНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ИСПАРЕНИЯ ИОННОЙ ЖИДКОСТИ
BMImBF₄**

Дунаев А.М., Моталов В.Б., Кудин Л.С.*

ИГХТУ, Иваново, Россия

**amdunaev@ro.ru*

Известно, что ионные жидкости на основе имидазолия с тетрафторборат анионом обладают сложным составом пара. Для установления природы компонентов насыщенного пара и нахождения их термодинамических характеристик проведено комплексное исследование ионной жидкости 1-бутил-3-метилимидазолий тетрафторборат, включающее масс-спектрометрию Кнудсена, ИК-спектроскопию, термический и ЯМР-анализ, газовую хроматографию и квантово-химические расчеты.

Установлено, что состав конденсированной фазы не претерпевает заметных изменений в процессе нагревания и испарения жидкости. В интервале температур 424-514 К в масс-спектрах объекта исследования обнаружены ионы, относящиеся как к самой ионной жидкости, так и продуктам ее превращения. В первую очередь следует отметить продукты взаимодействия катиона с анионом – илидены, концентрация которых достигает 70% от ионной жидкости. Другой характерной особенностью является возможная циклизация исходного соединения. Продукты данного превращения в масс-спектре ионизации электронами доминируют и их доля (как и доля илиденов) растет с течением времени и температуры.

Выявленные особенности испарения указывают на невозможность использования интегральных методов определения давления насыщенного пара для нахождения термодинамических характеристик. Тем не менее, по наклону температурной зависимости ионного тока родительского катиона BMIm⁺ была определена энтальпия испарения ионной жидкости, равная 136±4 кДж/моль.

**ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАИБОЛЕЕ ТУГОПЛАВКИХ ВЕЩЕСТВ
(ГРАФИТ И КАРБИДЫ) В ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР 2000 – 7000 К**

Савватимский А.И.,^{1,2} Онуфриев С.В.¹*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²ФИАН, Москва, Россия

**savva@iht.mpei.ac.ru*

Рассмотрены экспериментальные исследования по плавлению тугоплавких веществ (графит и карбиды) при высоких температурах, в твердой фазе вблизи плавления, при плавлении и в жидком состоянии (вплоть до 7000 К). Метод нагрева – импульсный нагрев током в течение единиц микросекунд. Образцы – в виде тонких пластинок (толщиной от 1 микрона до 200 микрон). Импульсные токи от 1кА до 30 кА, в зависимости от толщины образцов. Время нагрева – порядка 5 микросекунд. Измерялись: введенная энергии, теплоемкость, электросопротивление — в зависимости от измеряемой температуры Т. Последняя измерялась быстродействующим пирометром на основе скоростного фотодетектора PDA-10A (Thorlabs). Калибровка Т — по излучению температурной лампы до 2500 К. Выше — температурная шкала строилась на основе формулы Планка при известной нормальной излучательной способности вещества (литературные данные). Использовалась также плавящаяся модель черного тела,

изготовленная из исследуемого вещества в виде двух сомкнутых пластинок с зазором с одной стороны (клиновидная модель черного тела). Теория и практика таких измерений были опубликованы ранее (смотри в книгах [1,2]). В докладе рассмотрены следующие вопросы: 1) Использование образцов графита марки НОРГ (российский аналог УПВ-1Т) в виде тонких слоев чистотой 99.99%. Подготовка образцов карбидов (ZrC, HfC, TaC) — методом магнетронного напыления из твердой фазы. 2) Измерение температуры при быстром процессе нагрева (модель черного тела или выбор излучательной способности). Проблема плавления графита. 3) Измерение электросопротивления и теплоемкости (в том числе C_p и C_v). 4) Появление нестационарных парных дефектов Френкеля перед плавлением. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-22-00273-П).

1. Савватимский А.И. Плавление графита и свойства жидкого углерода. Физматкнига, 2013 или 2014 (2-е издание), 257 с.
2. Savvatimskiy A.I. Carbon at high temperatures, Springer series in Materials Science, 2015, V.134, P.1-246.

ПОСЛЕДНИЕ ДОСТИЖЕНИЯ В ИЗУЧЕНИИ ПРОЦЕССОВ ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ГРАФИТА МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОГО НАГРЕВА ПРИ ДАВЛЕНИИ ДО 6 КБАР

Вервикишко П.С., Шейндлин М.А.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**pvervikishko@gmail.com*

Температура плавления графита и характер жидкого углерода остается предметом постоянных дискуссий в литературе на протяжении многих десятилетий. Основной причиной этой несогласованности является чрезвычайно высокая температура плавления графита, что делает его наиболее тугоплавким материалом. В настоящем исследовании рассматривается дальнейшее совершенствование технологии лазерного нагрева, впервые использованной в [1], с целью достижения более высокой воспроизводимости результатов, улучшения и расширения средств оптических измерений и лучшего контроля процесса охлаждения и кристаллизации жидкого углерода. Важным аспектом этой работы является изучение природы точки перегиба на термограмме, восходящей из-за образования жидкого углерода, впервые описанного в [1]. Поскольку характер этого перегиба можно объяснить только меньшей теплопроводностью жидкого углерода по отношению к исходному твердому веществу, изучение изменения величины перегиба с ростом давлением может в значительной степени способствовать получению новых знаний о природе жидкого углерода.

В настоящей работе исследованы изменения теплопроводности жидкого углерода в области от 0,15 до 6 кбар. Оказывается, теплопроводность неуклонно возрастает от давления тройной точки до около 6 кбар. Это означает, что, если будет достигнута определенная корреляция между тепловой и электрической проводимостью, существующие разногласия между многочисленными исследованиями плавления графита могут быть успешно решены. Более того, благодаря визуализации образования жидкого углерода специально созданной системой с высокоскоростной камерой и мощным диодным лазером, используемым в качестве осветителя, наконец подтверждается факт плавления графита при высоком давлении.

-
1. M.Musella, C.Ronchi, M.Brykin and M.Sheindlin. The molten state of graphite: An experimental study. //J. of Applied Physics, 84, No.5 (1998), p.2530-2537.

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ В ТРЕХМЕРНОМ УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНОМ КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ

Брыкин М.В.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

mbrykin@gmail.com

Проведены расчеты динамики температурного поля в трехмерном углерод-углеродном композиционном материале (УУКМ), нагреваемым с поверхности равномерно распределенным тепловым потоком (лазерным излучением). Показано, что при учете только радиационного механизма охлаждения поверхности вблизи нее формируется область с сильно неоднородным распределением температуры. Перепад температуры достигает сотен К на начальной стадии нагрева и десятков К в стационарном состоянии. Этот эффект обусловлен сильной анизотропией теплопроводности волокон, различающейся почти на 2 порядка в продольном и поперечном направлении. Учет испарительного механизма охлаждения, обусловленного сублимацией материала УУКМ в вакуум или внешнюю инертную атмосферу, несколько уменьшает неоднородность температурного поля на поверхности. Скорость испарения рассчитывалась с учетом отличия индивидуальных коэффициентов испарения разных компонент пара углерода от единицы и так называемых скачков параметров в кнудсеновском слое [1, 2]. Ее резкая зависимость от температуры, особенно в струйном режиме, приводит к различной скорости сублимации с различных участков поверхности и формированию ее сложного рельефа. В частности, разрушается начальная целостная структура материала, что может приводить к его более быстрому по сравнению с сублимационным механизмом уносу в результате возникающих термических напряжений и растрескивания. Показано, что хотя скорости испарения в вакуум и среду с противодействием при одинаковой температуре поверхности различаются очень сильно, в стационарном состоянии это различие практически нивелируется за счет разницы установившейся средней температуры.

1. Брыкин М.В., Воробьев В.С., Шелюхаев Б.П. Состояние пара вблизи испаряемой поверхности. ТВТ. 1987. Т. 25. № 3. С. 484.
2. Brykin M.V., Sheindlin M.A. On particularities of the vapor pressure measurements of refractory substances at very high temperatures. High Temp., 2018, vol. 56, no. 4.

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА КАРБИДА ЦИРКОНИЯ. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Фалыхов Т.М., Брыкин М.В., Петухов С.В., Шейндлин М.А.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**tfalyakhov@gmail.com*

Представлены экспериментальные данные о фазовой диаграмме карбида циркония ZrC_x , предваряемые результатами проведенного численного моделирования эксперимента. Основная проблема моделирования заключалась в отсутствии в литературе исчерпывающих данных об уравнении состояния в широком диапазоне температур и составов, включая твердую и жидкую фазы. Предложен приближенный способ расчета энтальпии ZrC_x . Проведены расчеты термограмм поверхности. Показано, в частности, что для любых составов на термограммах практически отсутствуют какие-либо особенности для температур, соответствующих началу плавления (солидус). Экспериментальные данные получены методом лазерного нагрева, одним из наиболее перспективных методов иссле-

дования фазовых диаграмм высокотемпературных материалов. Его эффективность была продемонстрирована, в частности, при изучении фазовой диаграммы нестехиометрического диоксида урана [1]. Образцы для исследования были изготовлены с помощью одностороннего статического прессования порошков с последующим спеканием в вакуумной печи. Порошки карбида циркония контролируемого состава были получены методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). Нагрев образцов осуществлялся мощным YAG-лазером. Использовались различные способы диагностики состояния поверхности образцов в процессе их нагрева и охлаждения: высокоскоростная киносъемка в отраженном свете, регистрация спектра излучения многоканальным спектропирометром, регистрация характера отражения от поверхности излучения вспомогательного лазера. Совместная обработка всех сигналов позволила надежно детектировать температуры солидуса, ликвидуса и высокотемпературной эвтектики в широком диапазоне составов, а также определить спектральную излучательную способность твердой и жидкой фаз. Полученные экспериментальные данные качественно полностью согласуются с результатами расчетов.

-
1. Manara D., Ronchi C., Sheindlin M., Lewis M., Brykin M. Melting of stoichiometric and hyperstoichiometric uranium dioxide. J. of Nucl. Mat. V. 342 (2005), Issue 1-3, pp. 148-163.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУХАТОМНЫХ СОЕДИНЕНИЙ АРГОНА

*Мальцев М.А.,^{*1,2} Морозов И.В.,¹ Осина Е.Л.¹*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

**maksim.malcev@phystech.edu*

Двухатомные соединения ионов аргона (аргиды) играют важную роль в масс-спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой в силу того, что при использовании аргона в качестве буферного газа указанные соединения могут возникать при взаимодействии аргона с исследуемыми веществами и другими компонентами плазмы. Для учета возможных искажений результатов измерений из-за наложения спектральных линий соединений аргона и исследуемых веществ необходима информация о термодинамических свойствах аргидов.

В данной работе представлены расчеты термодинамических функций следующих двухатомных соединений с аргоном: ArV^+ , ArCo^+ , Ar_2 , Ar_2^+ , ArH и ArH^+ . За основу расчетов были взяты различные полуэмпирические и теоретические модели потенциальных кривых для основных и возбужденных электронных состояний. Далее численно было решено стационарное уравнение Шредингера и рассчитаны колебательно-вращательные спектры молекул с использованием программы LEVEL [1] и оригинальной программы, описанной в работе [2]. Из полученных спектров были определены внутренняя статистическая сумма и основные термодинамические функции в диапазоне температур от 298 до 10000 К. Результаты внесены в термодинамическую базу данных ИВТАНТЕРМО-Онлайн [3].

-
1. Le Roy R.J. A Computer program for solving the radial Shroedinger equation for bound and quasibound levels // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2016. V. 186. P. 167.
 2. Maltsev M.A., Kulikov A.N., Morozov I.V. Thermodynamic properties of vanadium and cobalt argide ions, VAR^+ and CoAr^+ // Journal Conference Series. 2016. V. 774. P. 012023.
 3. Belov G.V., Dyachkov S.A., Levashov P.R. et al. The IVTANTHERMO-Online database for thermodynamic properties of individual substances with web interface // J. Phys. Conf. Ser. 2018. V. 946 P. 012120.

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И КОНДЕНСАЦИЯ УГЛЕРОДА ПРИ ДАВЛЕНИЯХ СВЫШЕ 200 БАР

Бгашева Т.В., Вервикишко П.С., Шейндлин М.А., Вальяно Г.Е.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**miptbusiness@gmail.com*

Свойства жидкого углерода такие, как плотность и электропроводность, в окрестности тройной точки слабо изучены. Анализируя литературные данные [1], [2], можно прийти к выводу, что углерод в жидкой фазе практически не электропроводен, однако при повышении давления внешней среды происходит переход в электропроводную фазу. Исследования параметров этого перехода не представлены в литературе. Таким образом, нетрудно прийти к выводу, что изучение параметров жидкого углерода при давлениях от тройной точки до нескольких килобар можно проводить только с использованием лазерного нагрева. В настоящей работе используется метод лазерного нагрева графита в камере с высоким давлением буферного газа [3]. В работе представлены результаты экспериментов по плавлению углерода с использованием лазерного нагрева в инертной атмосфере при давлениях 0,2-6,0 кбар. В качестве исходного материала использовался изотропный графит марки ЕС-02. Образцы, подвергнутые лазерному нагреву, с затвердевшими каплями жидкого углерода в зоне воздействия лазерного луча, анализировались с помощью растровой электронной микроскопии. Изучалась как поверхность закристаллизованного расплава, так и поверхность шлифов в плоскости, перпендикулярной поверхности образца. Часть сечений образцов с зоной расплава была получена методом ионной резки. Изучалась доля пустот в сечениях через зону расплава, что в предположении о быстрой закалке жидкости при скорости охлаждения 1 МК/с дает оценку для плотности жидкого углерода. На основе данного анализа была получена зависимость плотности жидкого углерода от давления до 6,0 кбар.

1. F. P. Bundy Melting of Graphite at Very High Pressure The Journal of Chemical Physics 38, 618 (1963).
2. G. R. Gathers, J. W. Shaner, D. A. Young. High temperature carbon equation of state. UCBI-51644 September 4, 1974.
3. M. Musella, C. Ronchi, M. Brykin and M. Sheindlin. The molten state of graphite: An experimental study. //J. of Applied Physics, 84, No.5 (1998), p.2530-2537.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ Y-Но

Черноскотов М. Ю., Ивлиев А. Д., Мешков В. В.*

РГППУ, Екатеринбург, Россия

**ad_i48@mail.ru*

Температуропроводность системы Y-Но была изучена нами ранее [1], при этом было показано, что концентрационные и температурные зависимости температуропроводности обнаруживают ряд необычных особенностей. Для установления конкретного характера изменения свойств нами было предпринято подробное исследование комплекса теплофизических характеристик двадцати образцов различного состава данной системы в интервале от 400 К до температуры плавления. Были изучены температуропроводность, относительная теплоемкость, теплопроводность, удельное электрическое сопротивление и электронная теплопроводность. Тепловые характеристики исследовались методом температурных волн [2] в атмосфере гелия. Электрическое сопротивление изучалось четырехзондовым методом

на постоянном токе тоже в атмосфере гелия. Фазовая диаграмма системы Y-Нс достаточно проста, и свидетельствует о неограниченной взаимной растворимости компонентов. В сплавах, богатых иттрием, при температурах, близких к плавлению, отмечен фазовый переход от ГПУ-структуры к ОЦК. Эксперимент показал, что температурные зависимости изученных свойств носят монотонный неубывающий характер. Перенос теплоты осуществляется в основном электронным механизмом. Коллективизированные электроны обладают многополосной энергетической структурой. В пределах погрешности измерений отсутствуют аномальные изменения свойств вблизи температур структурных переходов. Оценена решеточная составляющая теплопроводности. Концентрационные зависимости в целом имеют характер, установленный в [1], однако при этом обнаружилось дополнительные особенности. В частности, заметная разница в свойствах фиксируется только для областей, в которых концентрация гольмия менее 30%. Вследствие этого, правило Нордгейма для данных сплавов не выполняется. Магнитный вклад в рассеяние носителей не описывается в рамках имеющихся моделей. Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты No. 11-08-00275 и No. 14-08-00228).

-
1. Ивлиев А. Д., Куриченко А. А., Векшин И. М. // Теплофизика высоких температур, 2016, V. 54. No. 2. P. 219.
 2. Ивлиев А. Д. // Теплофизика высоких температур, 2009, V. 47. No. 5. P. 771.

МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ АКТИВНОЙ КОМПОНЕНТЫ НАПРЯЖЕНИЯ НА ОБРАЗЦЕ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ИМПУЛЬСНОМУ ДЖОУЛЕВУ НАГРЕВУ

Кондратьев А.М., Рахель А.Д.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**cpl593h@mail.ru*

Импульсный джоулев нагрев широко используется для изучения свойств металлов, графита и некоторых других проводящих материалов при высоких температурах и давлениях. Экспериментальная методика, которая позволила получить уникальные данные по теплофизическим свойствам расширенных жидких металлов и графита [1] заключается в том, что образец в форме тонкой полоски помещается между двумя пластинами сапфира (или кварцевого стекла) и нагревается импульсом электрического тока амплитудой 10 - 100 кА и временем нарастания порядка микросекунды. Для диагностики такого процесса измеряются временные зависимости тока, протекающего через образец и напряжения на образце. Это позволяет определять временные зависимости для тепла, рассеянного в образце и его сопротивления [2]. Однако, переменный ток, который течет по образцу, индуцирует в цепи высоковольтного делителя, используемого для измерения напряжения на образце, значительную электродвижущую силу. Чтобы определить активную компоненту напряжения, которая входит в выражения для тепла и сопротивления, необходимо вычесть этот индуктивный вклад из полного (измеренного) напряжения. В этой работе представлен метод, позволяющий определять активную компоненту напряжения с приемлемой точностью. Метод заключается в том, что напряжение на образце измеряется одновременно с помощью делителя напряжения и калиброванного токового шунта. Обсуждаются результаты таких измерений.

-
1. Kondratyev A. M., Korobenko V. N., and Rakhel A. D. // J. Phys.: Condens. Matter. 2016. V. 28. P. 265501.

2. Kondratyev A.M., Korobenko V.N., and Rakhel A.D. // Carbon. 2016. V. 100. P. 537.

**МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ
ЛАЗЕРНО-ИНДУЦИРОВАННОГО ИСПАРЕНИЯ ПИРОГРАФИТА
ВПЛОТЬ ДО 4400 К**

Фролов А.М.,* Шейндлин М.А.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**matotz@gmail.com*

Изучение сублимации графита при предельно высоких температурах возможно только в условиях квази-ленгмюровского режима испарения. Ранее в [1] состав пара при сублимации до 4100 К был исследован только для базисной плоскости пирографита. Учитывая анизотропную структуру кристалла графита, существовала настоятельная необходимость в сравнительном изучении испарения с разных поверхностей графитового кристалла. В настоящей работе представлены результаты зависимости состава пара при испарении как с- так и ab-поверхностей пирографита, который был выбран как модель идеального кристалла. Для анализа состава пара использовалась времяпролетная масс-спектрометрия с лазерным нагревом миллисекундными импульсами. Проведено сравнение результатов испарения различных молекулярных компонент с привлечением данных по коэффициентам испарения [2], измеренных при температурах до 2500К. Было подтверждено, что использование относительных коэффициентов испарения из [2] приводит к вполне адекватным результатам по составу пара при испарении графита вплоть до 4400 К.

1. Pflieger. R., Sheindlin M., Colle J.-Y. Advances in the mass spectrometric study of the laser vaporization of graphite. J. Appl. Phys. 2008. V. 104, P. 054902.
2. Burns R.P., Jason A.J., Inghram M.G. Evaporation Coefficient of Graphite. J. Chem. Phys. 1964. V. 40. P. 1161

**ПЛАВЛЕНИЕ АНИЗОТРОПНОГО ГРАФИТА ПРИ ОГРАНИЧЕНИИ
ОБЪЕМА**

Конюхов С.А.,*¹ Онуфриев С.В.,² Савватимский А.И.²

¹МИФИ, Москва, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия

**arcticdeer@yandex.ru*

На текущий момент графит считается самым тугоплавким материалом. Но существуют определенные ограничения на исследование его теплофизических свойств около точки плавления. В частности, графит плавится при давлении выше 120 атмосфер [1], поэтому нет возможности наблюдать жидкую фазу при нагреве графита в атмосферных условиях. Для изучения фазовой диаграммы при высоких температурах используют нестационарные методы, такие как импульсный нагрев лазером или электрическим током. Импульсный нагрев током позволяет создать избыточное давление в процессе самого эксперимента за счет ограничения объема вокруг образца [2].

Для образцов использовалась марка высокоплотного графита УПВ-1Т (аналог НОРГ). По результатам экспериментов были зафиксированы значения введенной энергии начала и конца плавления: начало плавления ($E = 11,5$ кДж/г), окончание ($E = 21,0$ кДж/г). Электросопротивление жидкого углерода близко к постоянному значению при ограничении его расширения.

В твердой фазе до плавления теплоемкость (в условиях близких к C_p) равна 2 Дж/г К и круто растет (в 2 раза) еще до начала плавления. В жидкой фазе (выше температуры плавления) теплоемкость снижается до величины 2 Дж/г К.

Резкий рост теплоемкости до точки плавления и резкий спад после плавления могут быть объяснены появлением в твердой фазе неравновесных парных дефектов Френкеля для обеспечения потери дальнего порядка и плавления. В жидкой фазе эти дефекты аннигилируют практически с той же скоростью (характерное время — 1 микросекунда).

1. N.A. Gokcen, E.T. Chang, T.M. Poston, D.I. Spencer, Determination of graphite-liquid-vapour triple point by laser heating, High Temp. Sci. 8 (1976) 81
2. Савватимский А.И. Плавление графита и свойства жидкого углерода. М.: Физматкнига, 2014, 257 с.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЕ (ДО 4000 К) ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ПАРА ПРИ ИСПАРЕНИИ ZrC_x И TaC_x В ОКРЕСТНОСТИ ЗОНЫ ГОМОГЕННОСТИ

Петухов С. В., Фролов А.М., Шейндлин М.А., Фалаяхов Т.М.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**petuhov.sergey@bk.ru*

Карбиды циркония и тантала наряду с другими сверхтугоплавкими карбидами являются перспективными материалами для ряда высокотемпературных приложений. Однако, имеющиеся данные по испарению и составу пара относятся к 60–70х годам прошлого века [1, 2]. Они получены с использованием стационарных методов нагрева и, соответственно, ограничены по температуре до 3000 К.

В настоящее время, появилась возможность анализировать состав паров выше точки плавления над поверхностью вещества с переменным составом [3] с использованием нагрева лазерными импульсами миллисекундной длительности и времяпролетной масс-спектрометрии. С использованием такого метода нами исследован состав паров карбидов циркония и тантала разного исходного состава в окрестности области гомогенности. Для измерения излучательной способности веществ в твердом и жидком состояниях использовался метод полихроматической пирометрии. Впервые получены данные по относительным давлениям различных молекулярных компонент пара над поверхностью жидких карбидов циркония и тантала. Показано, что пары карбида циркония при температурах свыше 3500 К в основном состоят из атомов углерода и циркония, с небольшой долей молекул ZrC_2 и Zr_2C . В парах над образцами с исходным соотношением $C/Zr > 0.8$ присутствуют, также, молекулы C_2 и C_3 , что возможно связано с испарением малых включений свободного углерода в карбиде. Оказалось, что при температуре более 4000 К, соотношение C/Zr в парах над поверхностью стремится к значению 0,2 вне зависимости от исходного состава.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00837.

1. Jackson H. F., Lee W. E. Properties and characteristics of ZrC. in Comprehensive nuclear materials. ed. R. J. M. Konings. 2012. Oxford. Elsevier. pp. 339–372.
2. Deadmore D. L. Vaporization of Tantalum Carbide-Hafnium Carbide solid Solutions Journal of the American Ceramic Society. 1965. pp. 357-359
3. Pflieger R., Colle J.Y., Iosilevskiy I., Sheindlin M. Urania vapor composition at very high temperatures. J. Appl. Phys. 2011. 109, p. 03351

СВОЙСТВА КАРБИДОВ В ТВЕРДОМ И ЖИДКОМ СОСТОЯНИИ (ОТ 2000 ДО 6000 К)

*Середкин Н.Н.,*¹ Онуфриев С.В.,² Савватимский А.И.,² Мубояджян С.А.,³ Евдокимов С.А.³*

¹МИФИ, Москва, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия, ³ФГУП ВИАМ, Москва, Россия
*nikser12@yandex.ru

Целью данной работы является экспериментальное исследование свойств тугоплавких карбидов в области плавления и жидкой фазе. В первую очередь, это относится к электросопротивлению, а также к тепловым свойствам (энтальпии, теплоемкости, введенной энергии).

Наиболее тугоплавкие материалы, необходимые для авиационной и космической техники — это соединения углерода с металлами. Однако графит, плавится только при давлении выше 120 атмосфер [1], причем он не обладает высокой ударной прочностью, характерной для тугоплавких металлов.

Результаты исследования свойства тугоплавких карбидов в наиболее широком диапазоне температур, важны также и для атомной энергетики, так как ядерное топливо в виде сферических микро-твэлов покрывается защитными слоями карбидов и графита.

Методом импульсного нагрева током (3–5 мкс) исследованы образцы карбида циркония (с повышенным содержанием углерода) [2]. Температура измерялась на образцах в виде клиновидной модели черного тела. Теплоемкость, электросопротивление (отнесенное к исходным размерам) и джоулева энергия нагрева измерялись в зависимости от измеряемой температуры. Начало фазового перехода (солидус) для ZrC+C фиксировалось при 3150 К, окончание фазового перехода (ликвидус) - при 3640 К. Полученные свойства дополняют картину поведения веществ, приведенную на фазовых диаграммах.

1. N.A. Gokcen, E.T. Chang, T.M. Poston, D.I. Spencer, Determination of graphite-liquid-vapour triple point by laser heating, High Temp. Sci. 8 (1976) 81.
2. A.Kondratyev, S.Muboyajan, S.Onufriev, A.Savvatimskiy, Journal of Alloys and Compounds 631 (2015) 52–59.

НАБЛЮДЕНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ГРАФИТА ПРИ ЛАЗЕРНОМ НАГРЕВЕ В ВАКУУМЕ

Васин А.А., Фролов А.М., Шейндлин М.А.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**av65536@gmail.com*

Экспериментальные результаты по плавлению графита до сих пор являются крайне противоречивыми. Так, использование нагрева прямым пропусканием тока для изучения плавления графита вблизи тройной точки углерода, оказалось невозможным в связи отсутствием у жидкого углерода необходимой электропроводности. Лазерное плавление [1] графита при высоком давлении позволило определить параметры тройной точки углерода: давление около 110 бар, температура — 4800 К. В данной работе сообщается о том, что образование жидкого углерода впервые наблюдалось на поверхности пирографита, нагреваемого в вакууме лазерным излучением с плотностью до 10^6 Вт/см². Нагрев поверхности образца осуществлялся лазерными импульсами миллисекундной длительности с нарастающей во времени скоростью увеличения мощности, что позволило достичь условий плавления, несмотря на поддерживаемый в камере вакуум. Температура поверхности

измерялась яркостным пирометром на длине волны 900 нм. Начало плавления фиксировалось по резкому увеличению отражения лазерного излучения от поверхности графита. Измеренная температура плавления составила 4650 ± 50 К.

1. Musella M., Ronchi C., Brykin M., Sheindlin M. The molten state of graphite: an experimental study. J. Appl. Phys. 1998. 84. p. 2530.

ВЛИЯНИЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕРМОСТОЙКИХ ПОКРЫТИЙ

Нагмутдинова А.И., Зайцев Н.Г., Мазилин И.В.*

ООО «ТСЗП», Щербинка, Россия

**a.nagmutdinova@tspc.ru*

На современном этапе развития техники конструкционные материалы авиа-, ракетно- и энергостроения функционируют в крайне жестких условиях работы (агрессивные среды, высокие температуры). Для продления срока службы деталей и установок применяют плазменные методы нанесения защитных термостойких покрытий различной природы и свойств. В данной работе исследованы коэффициент теплопроводности покрытий, полученных методом плазменного нанесения, порошков цирконатов редкоземельных металлов (Nd, Gd, La, Sm), влияние кристаллической структуры, термической обработки, толщины и пористости покрытия на теплофизические характеристики [1–3]. Исследования теплофизических свойств покрытий проводили импульсным методом на анализаторе LFA 457. Показано, что образцы с покрытием $Gd_2Zr_2O_7$ продемонстрировали самый низкий коэффициент теплопроводности при 900 °С (0,86 Вт/м*К). При этом самый высокий коэффициент теплопроводности проявляется у образца с цирконатом лантана. Однако, для данных образцов представляется закономерным корреляция показателей в зависимости от пористости и толщины покрытия. Показаны различия в значениях теплопроводности для цирконатов Nd, Gd, La, Sm. Показано влияние пористости и толщины покрытия на изменение значения теплопроводности.

1. М.Н. Nabibi. Hot corrosion behaviour of new candidates for thermal barrier coatings application in turbine simulated environments, 2014.
2. Т.П. Черняева и др. Металлофизические исследования перспективных сплавов циркония. Вопросы атомной науки и техники, 2000.
3. В.Г. Заводинский. Исследование механизма фазовой стабильности диоксида циркония, легированного магнием и кальцием. Перспективные материалы, No2, 2005.

ТЕРМОДИНАМИКА СУБЛИМАЦИИ ТРИИОДИДОВ ЛАНТАНОИДОВ

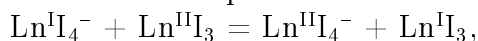
Кудин Л.С., Моталов В.Б., Дунаев А.М.*

ИГХТУ, Иваново, Россия

**lkudin@yandex.ru*

Методом высокотемпературной масс-спектрометрии изучена сублимация трийодидов лантаноидов LnI_3 ($Ln = La, Ce, Pr, Gd, Tb, Tm, Lu$). Образцы LnI_3 загружались в молибденовые эффузионные ячейки с соотношением площади испарения к площади эффузионного отверстия ≥ 400 . Исследование выполнено на магнитном секторном масс-спектрометре МИ1201.

В масс-спектре насыщенного пара ионизации молекулярного пучка электронами над всеми трииодидами в интервале температур 800 - 1000 К ($E = 40$ эВ) зарегистрированы ионы LnI_n^+ ($n = 0-3$), Ln_2I_n^+ ($n = 3-5$), Ln_3I_8^+ и двухзарядные ионы LnI_n^{++} ($n = 0-2$). В масс-спектре термоионной эмиссии обнаружены отрицательные ионы $\text{I}(\text{LnI}_3)_n^-$ с $n = 0-4$. Масс-спектры не изменялись со временем, что свидетельствует о термической стабильности трииодидов в исследованном интервале температур. Анализ кривых эффективности ионизации и температурных зависимостей ионных токов позволил заключить, что ионы с одним атомом лантаноида образуются при ионизации мономерных молекул, а ионы Ln_2I_n^+ и Ln_3I_8^+ из димерных и тримерных молекул, соответственно. По стандартной масс-спектрометрической методике определены парциальные давления компонентов пара. Для индивидуальных соединений и систем на их основе измерены константы равновесия гомогенных и гетерогенных ионно-молекулярных реакций:



Здесь Ln^{I} и Ln^{II} — два разных лантаноида. В рамках методик второго и третьего законов термодинамики рассчитаны энтальпии сублимации в форме мономерных и олигомерных молекул и энтальпии ионно-молекулярных реакций. На основе полученных результатов с привлечением имеющихся литературных данных рассчитаны энтальпии образования зарегистрированных молекул и ионов.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 4.3232.2017/4.6).

РАСЧЕТ ТЕПЛОТЫ ПЛАВЛЕНИЯ ТУГОПЛАВКИХ ГПУ-МЕТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ ПЕРВОПРИНЦИПНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРАВИЛО ТРУТОНА

Минаков Д.В., Левашов П.Р.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**minakovd@ihed.ras.ru*

Как известно, связь энтальпии испарения и температуры кипения многих веществ с хорошей точностью описывается универсальной эмпирической линейной зависимостью, предложенной Ф.Т. Трутоном и, как следствие, носящей его имя — правило Трутона. Похожая зависимость зачастую используется для оценки энтальпии плавления металлов в случае отсутствия непротиворечивых экспериментальных данных, что особенно актуально для тугоплавких металлов. В ряде теоретических работ было высказано мнение, что металлы с плотно-упакованной кристаллической структурой типа ГПУ и ГЦК должны иметь схожую величину энтропии плавления [1, 2]. В соответствии с этим предположением существующие теоретические оценки энтальпии плавления тугоплавких ГПУ-металлов, рения и осмия, были сделаны на основе анализа экспериментальных значений энтропии плавления тугоплавких ГЦК-металлов — родия, платины и иридия, и составляют 60,4 и 57,9 кДж/моль для рения и осмия, соответственно. Именно эти величины приводятся во многих справочниках, в том числе в популярном сборнике CRC Handbook of Chemistry and Physics [3]. Однако, некоторые эксперименты по быстрому импульсному нагреву образцов рения не подтверждают существующие оценки и демонстрируют значительно более низкую теплоту плавления около 30 кДж/моль [4].

В данной работе представлены прямые расчеты теплоты плавления тугоплавких ГПУ-металлов с использованием первопринципного метода квантовой молекулярной динамики. Результаты наших расчетов не подтверждают высокие значения теплоты плавления рения и осмия, предсказываемые с использованием экстраполяции зависимости теплоты плавления

ния от температуры плавления для тугоплавких ГЦК-металлов, но находятся в хорошем согласии с экспериментами по импульсному нагреву проводников.

1. H. Sawamura, Trans. Jpn. Inst. Met. 13, 225 (1972).
2. V.Ya. Chekhovskoi, and S.A. Kats, High Temp.-High Pressures, 13, 611 (1981).
3. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th ed., edited by D. R. Lide (CRC Press, Boca Raton, Florida, 2003).
4. J.W. Arblaster, Calphad, 20, 343 (1996).

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМОРФИЗИРУЮЩИХСЯ СПЛАВОВ Cu-Zr-Ti

Быков В.А., Ягодин Д.А., Куликова Т.В., Шуняев К.Ю.*

ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**wildrobert@gmail.com*

Исследование объемно-аморфных металлических сплавов является одним из наиболее обширных и бурно развивающихся направлений современного материаловедения. Среди множества таких сплавов особое место занимают системы на основе Cu-Zr. Основной загадкой является природа стеклообразующей способности систем на основе Cu-Zr, а также ее зависимость от состава системы и концентрации добавок других элементов.

Исследованы теплофизические, термические свойства и структура исходных $\text{Cu}_{50-x}\text{Zr}_{50-x}\text{Ti}_{2x}$ ($x = 1, 2, 3$ ат. процента) в широком интервале температур. По результатам рентгенодифракционных исследований все исходные образцы Cu-Zr-Ti, полученные после электродугового сплавления, содержали 3 фазы: моноклинную CuZr, тетрагональную $\text{Cu}(\text{Ti}, \text{Zr})_2$ и орторомбическую $\text{Cu}_{10}(\text{Zr}, \text{Ti})_7$. Проведены высокотемпературные исследования структурных превращений в сплавах Cu-Zr-Ti в условиях контролируемого нагрева. Установлена последовательность и тип реакций происходящих при термическом воздействии на сплавы Cu-Zr-Ti в широком интервале температур. По результатам исследования методами ДСК установлены температуры стабильности мартенситной фазы CuZr, эвтектонического распада и образования фазы CuZr в сплавах Cu-Zr-Ti в зависимости от содержания титана.

Построены концентрационные кривые температуропроводности и теплопроводности исходных сплавов Cu-Zr-Ti. В области температур от 300 до 1100 К наблюдается нелинейная зависимость концентрационных кривых температуропроводности и теплопроводности. На концентрационной кривой температуропроводности и теплопроводности наблюдается небольшой максимум при 2 ат. процента титана. При этом сохраняются низкие значения температуропроводности и теплопроводности для всех составов исходных сплавов Cu-Zr-Ti. Крайне низкие значения теплофизических свойств Cu-Zr-Ti сплавов нехарактерны для металлических систем и обусловлены особенностями электронной структуры, а также наличием различных дефектов кристаллической структуры в данных объектах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (№ гранта 16-02-00835).

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА УВСО ДО И ПОСЛЕ КРАТКОВРЕМЕННОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ПОТОКА ПЛАЗМЫ

*Рабаданова А.Э.,*¹ Гаджимагомедов С.Х.,¹ Палчаев Д.К.,¹ Рагимханов Г.Б.,¹
Исакаев М.-Э.Х.,² Гаджиев М.Х.,² Демиров Н.А.²*

¹ДагГУ, Махачкала, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия

**rabadanova.aida@mail.ru*

Выполнены исследования структуры и свойств керамического высокотемпературного сверхпроводника на основе сложного оксида $YBa_2Cu_3O_7$ до и после кратковременного воздействия высокоэнтальпийного потока плазмы аргона. Эти исследования направлены на оптимизацию параметров, обеспечивающих упрочнение поверхности изделий из высокопористой наноструктурированной керамики. Они является частью исследований, направленных на решение вопроса получения высокотемпературных сверхпроводников с градиентной структурой и свойствами. В перспективе будет решаться вопрос о возможности формирования на этой керамике текстурированного слоя с высокими значениями критического тока.

Образцы наноструктурированных керамик на основе $YBa_2Cu_3O_7$ изготавливались спеканием при 1193 К в течение 1 часа нанопорошка, полученного методом химической технологии. Такая технология обеспечивает высокую долю сверхпроводящей фазы с индексом при кислороде — 6,9 в один этап спекания. Однако, не смотря на возможность получения этим методом сверхпроводящих образцов с плотностями от 2,5 г/см³ до 6,0 г/см³, для них характерна низкая прочность, ввиду того, что контакты между зернами, представляющими собой агломераты из наночастиц, оказываются непрочными. Апробация упрочнения поверхности плазменным потоком привела к положительным результатам без существенных изменений исходной структуры и свойств этой керамики, связанных с кислородной стехиометрией и рекристаллизацией наночастиц. Установленные оптимальные параметры обработки при воздействии высокоэнтальпийного потока плазмы кислорода позволяют сохранить кислородную стехиометрию, но, так же как и после воздействия потока плазмы аргона, нарушается упорядоченное распределение кислорода по позициям, которые обеспечивают металлический ход проводимости.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-08-00092а и гос. задания № 3.5982.2017/8.9.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТЬ И ТЕПЛОЕМКОСТЬ ПЕСЧАНИКА

Абдулагатова З.З.,^{1,2} Абдулагатов И.М.,^{1,2} Каллаев С.Н.,² Омаров З.М.,²
Бакмаев А.Г.²*

¹ДагГУ, Махачкала, Россия, ²ИФ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

**abdulagatova@yandex.ru*

В работе представлены новые экспериментальные данные о температурной зависимости температуропроводности и теплоемкости образцов песчаника, полученных из Австралии (Университет Монаша в Мельбурне).

Исследования температуропроводности проводились методом лазерной вспышки на установке LFA-457 MicroFlash фирмы NETZSCH (Германия) в интервале температур от 302,9 до 774,25 К. Размеры образца составляли: диаметр 12,5 мм, толщина 1,0 мм. Измерение теплоемкости осуществлялось на дифференциальном сканирующем калориметре DSC 204 F1 Phoenix[®] фирмы NETZSCH в диапазоне температур от 308 до 763 К. Полученные экспериментальные данные температуропроводности хорошо согласуются с

предсказаниями различных теоретических и эмпирических моделей. Измеренные значения температуропроводности, теплоемкости и плотности были использованы для расчета теплопроводности образца песчаника. В области низких температур наблюдалось резкое снижение значений температуропроводности, что согласуется с предсказанием теории и более ранними исследованиями горных пород других авторов. А при высоких температурах температуропроводность практически не меняется (плавно переходит в состояние насыщения). Температурный коэффициент температуропроводности изменяется в пределах от $-0,0044 \text{ K}^{-1}$ до $-0,0013 \text{ K}^{-1}$, а температурный коэффициент теплопроводности изменяется от $-0,00221 \text{ K}^{-1}$ до $-0,00073 \text{ K}^{-1}$. В экспериментально исследованном диапазоне температур от 303 до 774 К, температуропроводность песчаника уменьшается на 40%.

Полученные экспериментальные данные были использованы для проверки точности и прогнозирующей способности различных теоретических моделей.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЕСТРУКЦИИ ТЕРМИЧЕСКИ НЕСТАБИЛЬНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Джаппаров Т.А.-Г., Базаев А.Р.*

ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

**timur507@mail.ru*

В работе предложена методика экспериментального определения температур начала термического разложения (деструкции) термически нестабильных жидкостей. В научной литературе приводятся плохо согласующиеся между собой результаты исследований термического разложения молекул чистых и растворенных в воде алифатических спиртов разными авторами [1–4].

По величине изотермического роста давления паров системы в пьезометре постоянного объема в течение длительного времени (до 48 часов) определены температуры начала термического разложения (деструкции) как чистых алифатических спиртов (метанол, этанол, 1-пропанол и 1-бутанол) так и растворенных в воде [5].

Получена зависимость температуры начала термического разложения T_n молекул индивидуальных спиртов от числа атомов углерода, а спиртов, растворенных в воде, от их структуры и концентрации.

Оценена скорость разложения молекул спиртов в зависимости от температуры T , числа атомов углерода C , а растворенных в воде и от их концентрации x .

Рассмотрено влияние термической деструкции молекул спиртов на изменения термических коэффициентов (изотермический коэффициент сжимаемости k_T , коэффициент объемного расширения α и термический коэффициент давления β) и основных термодинамических свойств (C_v , C_p , H , S , U , F , G) смесей вода–спирт.

-
1. Barnard J.A. and Hughes H.W. D. Trans. Faraday Soc. - 1960. N56. P.55- 63.
 2. Straty G.C. and others. // J. Int. Journal of Thermophysics. 1986. N5. P.1077-1089.
 3. Базаев Э.А., Базаев А.Р., Абдурашидова А.А. // ТВТ. 2007. Т 47. N2. С. 215-227.
 4. Калафати Д.Д. Рассказов Д.С. Петров Е.К. // Теплоэнергетика. - 1967. - Т.14. -С. 77-81.
 5. Джаппаров Т.А., Базаев. А.Р. // Теплофизика и аэромеханика. -2012. Т.19. N6. -С. 793-798.

ПЛОТНОСТЬ И ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ СПЛАВА УРАН–ХРОМ В ЖИДКОЙ ФАЗЕ

Качалов В.В.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

ongk@mail.ru

Методом максимального давления в газовом пузыре в двухкапиллярной модификации измерены плотность и поверхностное натяжение жидкого сплава 94,2% мас. урана — 5,8% мас. хрома в интервале температур $T_{пл}$ –1900 К. В качестве метода исследования выбран метод максимального давления в газовом пузыре. К достоинствам метода относятся хорошо разработанная теория, постоянное обновление поверхности образующегося пузыря в процессе эксперимента, из данных одного эксперимента получают плотность и поверхностное натяжение исследуемого расплава. Однако при традиционном исполнении этого метода с одним капилляром возникает ряд методических трудностей. Во-первых, точность измерения поверхностного натяжения ограничивается точностью регистрации глубины погружения капилляра в расплав. Во-вторых, необходимо вводить поправку на кривизну мениска в тигле, которая определяется краевым углом смачивания расплавом материала тигля и поверхностным натяжением исследуемого вещества, которые могут меняться в ходе эксперимента. В данной работе реализована двухкапиллярная схема метода максимального давления в газовом пузыре, впервые предложенная в [1]. Применение двух капилляров различных диаметров, погружаемых в расплав, устраняет необходимость учета кривизны мениска в тигле, а глубина погружения входит в поправку, величина которой мала по сравнению с измеряемыми величинами.

При исследовании плотности высокотемпературных и химически активных веществ из-за сложности заполнения пикнометра и трудностей, связанных с контролем уровня расплава в дилатометре, метод максимального давления в газовом пузыре становится конкурентоспособным этим двум наиболее распространенным методам исследования плотности.

Описаны экспериментальная установка и методика проведения измерений. Оценена доверительная погрешность полученных данных. Экспериментальные данные о плотности и поверхностном натяжении сплава уран–хром получены впервые. В исследованном интервале температур свойства расплава уменьшаются линейно с ростом температуры:

$$\rho \cdot 10^3 = 19,11 - 2,2215T,$$

$$\sigma = 2548,8 - 0,5960T,$$

где ρ — плотность в кг/м³, σ — поверхностное натяжение в мН/м, T — температура в К. Доверительные погрешности измерения ρ и σ оценены равными ± 28 кг/м³ и ± 52 мН/м.

Надежность экспериментальных данных, полученных по данной методике на этой экспериментальной установке, признана в современных обзорах и справочной литературе по результатам исследования плотности и поверхностного натяжения урана до температур 2100 К [2, 3].

Показано, что в пределах точности экспериментальных данных о плотности урана и хрома мольный объем сплава уран–хром описывается уравнением аддитивности вида

$$\nu_{\text{сплава}} = \nu_1\chi + \nu_2(1 - \chi),$$

где $\nu_{\text{сплава}}$, ν_1 , ν_2 — мольные объемы сплава и его компонентов, χ — мольная концентрация компонента.

2. Fokin, L. R., Liquid Uranium, Density Isobar of 1406–4500 K, Sbornik dokladov mezhdromstvennogo seminar TF-2007 (Collection of Papers to TF-2007 Inter-departmental Seminar), Obninsk: State Scientific Center of the Russian Federation—Leipunskii Institute of Energy Physics, 2008, p. 400.
3. Теплофизические свойства материалов ядерной техники / под ред. П. Л. Кириллова, М.: ИздАТ, 2007.

ВЛИЯНИЕ ЗАКАЛКИ НА СКОРОСТЬ УЛЬТРАЗВУКА В СТАЛЯХ

Рощупкин В.В., Ляховицкий М.М., Покрасин М.А., Минина Н.А.,
Кудрявцев Е.М.*

ИМЕТ РАН, Москва, Россия

**pokrasin@gmail.com*

Приведены результаты экспериментального исследования скорости ультразвука и относительного температурного расширения сталей 09Г2С, 30ХГСА, У8 и стали 45 в закаленном и отожженном состояниях в широком температурном диапазоне. Химический состав, область применения и условия термообработки сталей приведены в марочнике сталей. Характерной особенностью этих сталей является наличие альфа-гамма превращения при высоких температурах. Экспериментальное исследование скорости ультразвука проводилось по разработанной авторами Методике ГСССД МЭ 216-2014. Полученные опытные данные об относительном температурном расширении позволили не только повысить точность опытных данных о скорости ультразвука, в расчетные формулы которых входит длина образца, но и рассчитать температурную зависимость плотности сталей. При этом плотность при комнатной температуре определялась с высокой точностью методом гидростатического взвешивания. Кроме того, данные о скорости ультразвука и плотности позволяют рассчитать значения модуля Юнга. Опытные данные показали, что скорость ультразвука в закаленном образце заметно меньше, чем в отожженном. Однако в области фазового перехода их значения практически совпадают, что свидетельствует об отжиге образца. Опытные и рассчитанные значения свойств сталей в температурном диапазоне от комнатной до температуры начала фазового превращения обрабатывались методом наименьших квадратов, что позволило получить аппроксимирующие уравнения в указанном температурном диапазоне.

ПЛОТНОСТЬ И МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ СПЛАВА CoFeSiBNb

Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Михайлов В.А., Попель П.С.*

УрГПУ, Екатеринбург, Россия

**rusfive@mail.ru*

Представлены результаты исследования плотности и магнитной восприимчивости сплава $\text{Co}_{48}\text{Fe}_{25}\text{B}_{19}\text{Si}_4\text{Nb}_4$. По сравнению с другими составами, данный сплав показывает высокую способность к формированию объемно-аморфных стекол.

Сплав $\text{Co}_{48}\text{Fe}_{25}\text{B}_{19}\text{Si}_4\text{Nb}_4$ выплавлен из исходных компонентов в индукционной печи Leybold–Heraeus IS01/III. Цилиндрические образцы диаметром 2 мм были получены путем всасыванием в медную водоохлаждаемую изложницу.

Кинетику кристаллизации сплава изучали с помощью дифференциального сканирующего калориметра NETZSCH при скоростях нагрева 5, 10, 20 и 40 °С/мин. Плотность измеряли абсолютным методом проникающего гамма-излучения в интервале температур

от 20 до 1550 °С. Магнитную восприимчивость исследовали относительным вариантом метода Фарадея в интервале температур от 800 до 1500 °С. Опыты проводили в атмосфере высокочистого гелия при скорости нагрева 3 °С/мин. Использовали тигли из оксида бериллия.

Температурная зависимость плотности сплава в жидком состоянии близка к линейной. При понижении его температуры от максимальной отмечено его предкристаллизационное переохлаждение почти на 100 °С. Кривая охлаждения в твердом состоянии вплоть до комнатной температуры лежит существенно выше кривой нагрева.

На температурных зависимостях магнитной восприимчивости имеются две точки преобразования. Первая из них не наблюдается на температурных зависимостях плотности и в калориметрических опытах и соответствует, по видимому, полиморфному превращению, вторая соответствует плавлению образца. В жидком состоянии температурные зависимости магнитной восприимчивости могут быть аппроксимированы обобщенным законом Кюри–Вейса. На основании полученных результатов рассчитан эффективный магнитный момент, плотность состояний на уровне Ферми и парамагнитная температура Кюри.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-03-00433.

ВЛИЯНИЕ МЕХАНОАКТИВАЦИИ НА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРОШКООБРАЗНЫХ МЕТАЛЛОВ

Попов Д.А., Лебедев А.В., Рязанцева А.А., Малкин А.И.*

ИФХЭ РАН, Москва, Россия

**alex.lebedev@rambler.ru*

Проведены параллельные исследования удельной теплоемкости и микроструктуры порошков ряда металлов, подвергнутых механоактивации в высоконапряженной планетарной мельнице. Методами рентгеновского дифракционного анализа и дифференциальной калориметрии установлено, что характер изменения микроструктуры и физико-химических свойств порошков под воздействием активации у хрупких и пластичных металлов различен. У твердых металлов, в частности у вольфрама, механоактивация которых сопровождается измельчением частиц, наблюдаются такие изменения микроструктуры, которые приводят к уменьшению величины параметра кристаллической решетки и к появлению дополнительных внутренних напряжений сжатия. Величина удельной теплоемкости у таких металлов после активации увеличивается во всем измеренном интервале продолжительности активации. При этом изменяется и характер температурной зависимости теплоемкости. У пластичных металлов (например, у алюминия), механоактивация которых сопровождается агрегацией частиц, изменение микроструктуры приводит к увеличению величин параметра решетки и к появлению внутренних напряжений растяжения. При этом величина удельной теплоемкости после механоактивации продолжительностью от 5 до 21 минуты уменьшается.

**ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТЬ СИСТЕМЫ NI-V С СОДЕРЖАНИЕМ
ВАНАДИЯ ДО 22 ат.% ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ**

**Ахтямов Э.Р.,¹ Полев В.Ф.,² Коршунов И.Г.,² Куриченко А.А.,²
Горбатов В.И.*^{2,3}**

¹УралНИИСтром, Челябинск, Россия, ²УГГУ, Екатеринбург, Россия, ³ИТФ УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

*gorbatov@ursmu.ru

Данное исследование является продолжением работы [1], в которой было замечено, что при растворении в чистом никеле от 8 до 17 ат.% ванадия политермы температуропроводности испытывают небольшой скачок, размытый в интервале температур 1050–1170 К. На фазовой диаграмме этому диапазону температур и концентраций соответствует область твердого раствора, которая справа граничит с областью двухфазного состояния (Ni)+Ni₃V, а ниже 680 К — с областью упорядочения Ni₈V. Исследования, выполненные в работе [2] на образцах с содержанием 16–19 ат.% V, показали, что при закалке от высоких температур в них образуется модулированная структура, которая при последующем отжиге ниже 1080 К приводит к образованию двухфазного состояния (Ni)+Ni₃V.

В данной работе приводятся результаты измерения температурных зависимостей температуропроводности, удельного электросопротивления и термоЭДС сплавов Ni-V с содержанием ванадия от 7 до 22 ат.% при высоких температурах в режиме термоциклирования со средней скоростью нагрева-охлаждения 0,06 К/с.

Установлено, что в интервале температур от 1050 до 1170 К фононная составляющая теплопроводности (в отличие от электронной составляющей) испытывает скачок, величина которого растет с увеличением в сплавах концентрации ванадия. При этом политермы удельного электросопротивления испытывают излом вблизи ~900 К, причем угол излома уменьшается с ростом концентрации ванадия. Исходя из этого, предполагается, что наблюдаемые аномалии политерм температуропроводности сплавов Ni-V с концентрацией ванадия ниже 16 ат.% связаны с формированием в этих сплавах модулированных структур растворенного компонента.

-
1. Полев В.Ф., Старцева М.И., Горбатов В.И., Глаголева Ю.В., Коршунов И.Г. // ФММ. 2012. Т. 113. №. 1. С. 43.
 2. Moreen H.A., Taggart R., Polonis D.H. // Metallurgical Transactions. 1974. V. 5, P. 79.

ON PHASE TRANSITIONS IN DIFFERENT METALS

Rososhek A.,^{*1} Efimov S.,¹ Tewari S.,¹ Yanuka D.,² Krasik Ya.E.¹

¹*Technion, Haifa, Israel, ²Imperial College, London, United Kingdom (Great Britain)*

**sasharos@campus.technion.ac.il*

Results of underwater electrical explosion of single wires made from Cu, Al, T, Mo and Ta are presented and analyzed. Experimental research was carried out using microsecond timescale generators having 33/180 kA, 33/45 kV and 1200 ns of current amplitude, resistive voltage and rise-time respectively. The discharge current was measured by a current viewing resistor or Rogowski coil and the resistive voltage was calculated from the measured voltage by a voltage divider accounting for inductive voltage. These data coupled with data from Optronis Optoscope SC-10 streak camera and 1D MHD simulation was used to study the phase transitions in different metals at extreme conditions, i.e. the moment when a transition occurs, life-time of a phase and energy density in the wire at the moment of transition.

**АБЛЯЦИЯ ТИТАНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ
ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ**

Струлева Е.В.,* Комаров П.С.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**struleva.evgenia@yandex.ru*

Быстрый нагрев металлов фемтосекундными лазерными импульсами (ФЛИ) и последующее неравновесное объемное плавление поверхностного слоя на пикосекундных временах сопровождаются развитием кавитационных процессов, ростом пузырьков паровой фазы в расплаве в волне разрежения и абляцией его части в виде тонкого откольного слоя в конденсированном состоянии [1].

В настоящей работе было проведено экспериментальное исследование лазерной абляции титана при нагреве мощными ФЛИ с интенсивностью $10^{12} \div 10^{13}$ Вт/см².

С помощью «rimpr-probe» микроскопии был измерен порог термомеханической абляции титана по поглощённой энергии. Для этого было определено значение коэффициента отражения вблизи абляционного порога. Методом интерференционной микроскопии была оценена глубина кратеров при различных превышениях плотности энергии над пороговым значением. Были проведены исследования формы кратеров абляции и рельефа наноструктурированной поверхности образцов титана в области лазерного воздействия с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ). Была получена зависимость глубины кратера от плотности энергии нагревающего импульса.

1. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. // УФН. 2002. Т. 172. Н. 3. С. 301.

МИКРОВОЛНОВАЯ ДОППЛЕРОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА УДАРНО-СЖАТОЙ ПЛАЗМЫ АРГОНА

Богданов Е.Н., Жерноклетов М.В., Козлов Г.А., Медведев А.Б.,
Родионов А.В.*

РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров, Россия

**postmaster@ifv.vniief.ru*

С использованием метода микроволновой диагностики [1] на основе радиоинтерферометров с длинами волн 3,2 и 2,1 мм исследованы кинематические и электрофизические характеристики плазмы ударно-сжатого аргона, изначально находившегося при атмосферном давлении. Исследование проведено в диапазоне давлений от 12 до 62 МПа и скоростей ударных волн от 3,1 до 6,6 км/с. Полученные данные о кинематических параметрах согласуются с известными данными и расчетом по модифицированной модели Ван-дер-Ваальса [2]. Получен массив коэффициентов отражения электромагнитного излучения на длинах волн 3,2 и 2,1 мм от фронта ударной волны, на основании которого оценена проводимость и концентрация электронов во фронте ударной волны. Экспериментальные данные согласуются с расчетом по модифицированной модели Ван-дер-Ваальса в диапазоне скоростей $D=3,1\div 3,6$ км/с. При дальнейшем увеличении скорости обнаружено явление постоянства коэффициента отражения.

1. Микроволновая диагностика. Глава 5 в кн. Невозмущающие методы диагностики быстропротекающих процессов / Под ред. доктора техн. наук А. Л. Михайлова. – Саров: ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015.-322 с.
2. Медведев А.Б. Уравнение состояния и коэффициенты переноса аргона на основе модифицированной модели Ван-дер-Ваальса до давлений 100 ГПа // ФГВ, 2010, т. 46, №4, с. 116-126.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ МЕТАЛЛОВ

Апфельбаум Е.М.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

apfel_e@mail.ru

Различные теплофизические свойства веществ изучаются на протяжении более чем 100 лет. (Здесь под ними рассматриваются уравнение состояния и электронные транспортные коэффициенты — электропроводность, теплопроводность, термоэдс). Однако, изучение этих свойств для различных металлов при высоких температурах ($T \geq T_0$, $T_0 \approx 5$ кК) представляет собой всё ещё очевидные сложности. Эти высокотемпературные состояния прежде всего тяжело получить в эксперименте. Надёжные теории же существуют для очень низких плотностей (почти идеальный газ или слабонеидеальная плазма при повышении T), а также в жидком металле в окрестности линии плавления. В остальной области теории и расчёты тоже существуют, но они не столь надёжны и приводят к неоднозначным результатам. Однако, в последние два десятка лет появились новые измерения для плазмы металлов, в которых изучаемые свойства были измерены в достаточно широком диапазоне параметров [1, 2]. Это позволяет проверить и уточнить существующие методы расчёта.

Ранее нами была разработана модель расчёта изучаемых свойств в области низкотемпературной плазмы металлов [3]. Это температуры $T=10\text{--}100$ кК и плотности меньше критических. Она построена на химическом подходе, который рассматривает вещество как смесь электронов, положительных ионов и атомов и т.д. В рамках такого подхода можно

найти не только термодинамические функции, но и концентрации отдельных компонент, т. е. химический состав вещества. Далее этот состав используется для расчёта электронных транспортных коэффициентов в приближении времени релаксации. В настоящей работе мы представляем результаты расчёты по нашей модели для ряда металлов, таких как Ni, Fe и Mo. Наши результаты сравнивались с имеющимися расчётами и экспериментами других авторов и было получено хорошее согласие.

-
1. DaSilva A.W., Vunni G.B. // Phys. Rev. 2011. V. 83. No. 3. 037402.
 2. Clerouin J. et. al. // Phys. Plasmas 2012. V. 19. No. 8. 082702.
 3. Apfelbaum E. M. // High Temp. 2017. V. 55. No. 1. P. 1.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ СВИНЦА

Коробенко В.Н., Рахель А.Д.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**vkorobenko@gmail.com*

Изучение свойств неидеальной плазмы представляет собой достаточно сложную экспериментальную задачу. Для такой плазмы степень ионизации должна быть порядка единицы, а потенциальная энергия взаимодействия ионов сопоставима с кинетической энергией их теплового движения. Чтобы создать такую плазму можно сжимать газ при помощи сильной ударной волны, а можно путем нагрева металлического образца импульсом электрического тока, осуществить однородное тепловое расширение образца в газообразное состояние [1]. Ввиду удаленности этого состояния от начального состояния образца на фазовой диаграмме, задача поддержания однородности образца становится особенно сложной. В настоящей работе для изучения теплофизических свойств плотной плазмы свинца используется экспериментальная методика [1]. В качестве образца бралась полоска свинцовой фольги толщиной 10–30 мкм, которая помещалась в слойку между двумя пластинами сапфира (или/и кварцевого стекла). Нам удалось провести измерения термодинамических функций и удельного сопротивления плазмы свинца в диапазоне плотности 0,36–0,04 от ее нормального значения. Для этой плазмы нами определены зависимости удельного сопротивления, коэффициента Грюнайзена и скорости звука от плотности и удельной энтальпии. Тепловое расширение образца измерялось с помощью интерферометра Майкельсона. Такой интерферометр позволил уменьшить влияние многолучевой интерференции и тем самым повысить точность измерения плотности образца по сравнению с точностью интерферометра [2].

-
1. Kondratyev A. M., Korobenko V. N., and Rakhel A. D. // J. Phys.: Condens. Matter. 2016. V. 28. P. 265501.
 2. Kondratyev A. M., Korobenko V. N., and Rakhel A. D. // Carbon. 2016. V. 100. P. 537.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛОТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ В КВАЗИХИМИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

*Грязнов В.К.,*¹ Иосилевский И.Л.^{2,3}*

¹ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия, ³МФТИ, Долгопрудный, Россия

**grvk@icp.ac.ru*

Интерес к исследованию термодинамических свойств молекулярных газов при высоких давлениях и температурах связан как с их широким распространением в природе, так и с широким применением в различных высокоэнергетических устройствах. При давлениях мегабарного диапазона, где высокая плотность вещества сопровождается сильным кулоновским взаимодействием (сильно неидеальная плазма) теплофизические свойства газов теоретически описывались как в рамках квазихимического представления (модель свободной энергии), так и "первопринципными" методами, использующими прямое численное моделирование системы ядер и электронов. Несмотря на достигнутые успехи как в экспериментальных, так и теоретических исследованиях, дальнейшее изучение свойств плотных газов в этой области параметров имеет большое значение. Имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные по калорическому и термическому уравнению состояния перекрывают диапазон давлений от килобар до десятков мегабар и высоких плотностей. В последнее время были получены и теоретические результаты, как в рамках химической модели, так и первопринципными методами в широком диапазоне параметров. В данной работе представлены результаты вычисления изохор водорода в широком диапазоне температур, ударных адиабат дейтерия и азота и изоэнтроп дейтерия до мегабарных давлений. Результаты были получены при помощи кодов, реализующих усовершенствованные модели семейства SAHA. Вычисления показали, что в рассматриваемом диапазоне динамических давлений сжатые молекулярные газы представляет собой сильно неидеальную вырожденную плазму с плотностями близкими к плотности конденсированного вещества. Результаты проведенных вычислений представлены в сравнении с данными, полученными при расчете из первых принципов и данными экспериментов. Показано, что представляемый подход позволяет получить адекватное описание теплофизических свойств молекулярных газов в широком диапазоне температур и давлений, обеспечивая удовлетворительное согласие как с экспериментом, так и другими теоретическими подходами.

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА В МЕГАБАРНОЙ ОБЛАСТИ КВАЗИИЗЭНТРОПИЧЕСКОГО СЖАТИЯ

*Голышев А.А.,*¹ Соболев Д.В.,² Молодец А.М.¹*

¹ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия, ²МГУ, Москва, Россия

**golyshev@icp.ac.ru*

Политетрафторэтилен (фторопласт-4, тефлон) широко используется в качестве высокоомного изолятора, сочетающего химическую стойкость с высокой температурой плавления и разложения. Поэтому тефлон используется в качестве изолятора не только в обычных условиях, но и при измерении электросопротивления материалов в условиях динамического нагружения. Как известно электрическое сопротивление большинства материалов в экстремальных условиях высоких давлений ударного сжатия может уменьшаться. Тефлон в этом случае не исключение, его электросопротивление уменьшается с давлением. Соответственно измерения электропроводности тефлона в условиях высоких давлений ударного сжатия проводились в ряде работ (см. [1–3] и ссылки в них).

В практике измерения электросопротивления ударносжатых материалов зачастую требуются проводить измерения в областях фазовой диаграммы с пониженными температурами (см., например, [4]). В связи с этим в представляемой работе проведены измерения электросопротивления тефлона в области фазовой диаграммы с давлениями на мегабарном уровне и пониженными (за счёт уменьшения до криогенных начальных температур) температурами.

В выполненных экспериментах по измерению электропроводности тефлона, в указанных выше условиях, зафиксировано высокопроводящее состояние тефлона. Показано, что минимальные значения электросопротивления тефлона регистрируется при давлении 80 ГПа и выше. Эффект скачкообразного уменьшения электросопротивления ударносжатого тефлона обратим: в волне разгрузки при давлении ~ 80 ГПа электросопротивление тефлона возвращается к практически исходному значению.

1. Таржанов В.И., Жугин Ю.Н., Крупников К.К. // ПМТФ. 1997. Т.38. №.6. с.16-22.
2. Бордзиловский С.А., Караханов С.М. // ФГВ. 2002. Т. 38. №.6. с.127-133.
3. Голышев А.А., Молодец А.М. // ФГВ.2013. Т.49. №.2. с.106-112.
4. Ананьин А.В., Дремин А.Н., Канель Г.И. // ФГВ. 1981. Т.17. №.3. с.93-102.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА

*Шаленов Е.О.,¹ Джумагулова К.Н.,¹ Рамазанов Т.С.,¹ Рёнке Г.,²
Рейнхольц Х.²*

¹НИИЭТФ, КазНУ им. Аль-Фараби, Алматы, Казахстан, ²Институт физики,
Университет Росток, Росток, Германия

*shalenov.erik@mail.ru

В течение последних нескольких лет было опубликовано много работ, в которых были исследованы транспортные свойства плотной плазмы, в том числе электропроводность полностью ионизированной водородной плазмы [1–3]. Нами были вычислены динамические частоты столкновений и проводимость плотной квазиклассической водородной плазмы на основе эффективного потенциала взаимодействия [4] (с учетом эффектов экранировки и дифракции). Для расчета частоты столкновений был использован квазиклассический метод. Используя обобщенную Друде формулу, была исследована динамическая проводимость. Влияние электрон-электронных взаимодействий учитывалось на уровне частоты столкновений с помощью фактора перенормировки. Полученные результаты по динамической проводимости хорошо согласуются с данными других авторов, в частности с молекулярно-динамическим (МД) моделированием, которое также учитывало электрон-электронные взаимодействия.

1. Nurekenov Kh.T., Baimbetov F.B., Redmer R., Röpke G. // Contrib. Plasma Phys. 1997. V. 37. P. 473.
2. Reinholz H., Röpke G., Rosmej S., and Redmer R. // Phys. Rev. E 2015. V. 91. P. 043105.
3. Arkhipov Yu.V., Baimbetov F.B., Davletov A.E., Starikov. K.V. // J. Plasma Physics 2002. V. 68. P. 81.
4. Shalenov E.O., Rosmej S., Reinholz H., Röpke G., Dzhumagulova K.N., Ramazanov T.S. // Contrib. Plasma Phys. 2017. V. 57. P. 486.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ НАБЛЮДЕНИЕ ЯВЛЕНИЯ СНИЖЕНИЯ ВЕРОЯТНОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ВЫСОКОВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ В ЭЛЕКТРОДУГОВОЙ ПЛАЗМЕ ГЕЛИЯ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ

*Кавыркин Д.И.,*² Кутузов Д.С.,¹ Чиннов В.Ф.²*

¹РНЦ КИ, Москва, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия

**dimakav@rambler.ru*

Представленная работа посвящена экспериментальному исследованию распределения заселенностей возбужденных состояний атомов гелия при приближении к порогу ионизации. Благодаря абсолютной калибровке спектрометра по зарегистрированным интенсивностям спектральных линий HeI были измерены концентрации излучающих состояний, при этом было установлено, что плазма дугового разряда в гелии при атмосферном давлении является в значительной степени ионизационно неравновесной. Распределение населенностей возбужденных состояний с главным квантовым числом $n > 4$ спадает с возрастающей при приближении к порогу ионизации крутизной, так что линии, соответствующие переходам с уровней $n \geq 7$ в спектре не наблюдаются. Таким образом, впервые было экспериментально получено подтверждение предсказанного во многих теоретических работах явления снижения вероятности реализации высоковозбужденных состояний плазмы гелия атмосферного давления [1] и наличия в такой плазме неравновесного распределения возбужденных состояний ионизационного характера [2]. При этом, несмотря на то, что полученное распределение не описывается законом Больцмана с электронной температурой, удалось определить температуру и концентрацию электронов в плазме. Концентрация электронов была определена из анализа контуров уширенных за счет эффекта Штарка спектральных линий, которая составила $n_e = 9 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, что примерно на 20%, ниже ее равновесного значения. Наличие в спектре линий ионизованного гелия дало возможность, зная n_e , определить и T_e из соотношения интенсивностей атомарных и ионной линии, рассчитанное таким образом значение составило $T_e = 3 \text{ эВ}$, при этом разброс значений, получаемый при использовании различных пар атомарная линия-ионная линия не превышал 10%. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00292.

1. Г.К. Кобзев, Ю.К. Куриленков, Г.Э. Норман//ТВТ. Т.15. №1. С.193. 1977.

2. Jonkers J., Vos H.P.C., van der Mullen J.A.M., Timmermans E.A.H.// Spectrochimica Acta B. 1996. V. 51 No. 5. P. 457.

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ГОРЯЧЕЙ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ

*Коданова С.К., Рамазанов Т.С., Исанова М.К.**

КазНУ, Алматы, Казахстан

**issanova@physics.kz*

Исследование транспортных свойств плотной плазмы является одним из важных задач в физике инерциального термоядерного синтеза (ИТС), горячей плотной материи на пучках тяжелых ионов. Расчет параметров драйвера тяжелоионного инерционного синтеза требует адекватного и точного количественного описания процесса взаимодействия тяжелоионного пучка с плотной плазмой в широком диапазоне параметров мишени. Знание транспортных свойств в плазме позволит более точно вычислить конструкцию термоядерной мишени. Эти свойства плазмы должны быть точно рассчитаны с учетом как квантовых, так и коллективных эффектов в плазме. Одним из важных значений, описы-

вающих транспортные коэффициенты дейтерий-тритиевой плазмы, является кулоновский логарифм. Кулоновский логарифм был получен на основе эффективных потенциалов. Эти потенциалы взаимодействия учитывают квантовые эффекты дифракции на малых расстояниях и экранировку на больших расстояниях. Для применения в ИТС были рассчитаны вязкость, диффузия, теплопроводность и электропроводность плотной плазмы в широком диапазоне плотностей и температур. Результаты, полученные для вязкости, диффузии, теплопроводности и электропроводности сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и результатами квантового моделирования молекулярной динамики.

-
1. Fortov V. E. // *Extreme states of matter on Earth and in the Cosmos*, Springer, 2009.
 2. Ramazanov T. S., Kodanova S. K., Moldabekov Zh. A., Issanova M. K. // *Phys. Plasmas* 2013. V. 20. P. 112702.
 3. Kodanova S. K., Ramazanov T. S., Issanova M. K., Moldabekov Zh. A., Nigmatova G. // *Contrib. Plasma Phys.* 2015. V. 55. No. 2-3. P. 271.
 4. Adams J. R., Shilkin N. S., Fortov V. E., Gryaznov V. K., Mintsev V. B., Redmer R., Reinholz H., and Ropke G. // *Phys. Plasmas* 2007. V. 14. P. 062303.
 5. Hu X., Collins L. A., Boehly T. R., Kress J. D., Goncharov V. N. and Skupsky S. // *Phys. Rev. E.* 2014. V. 89. P. 043105 .

**РАЗРАБОТКА ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСОВ ДЛЯ ОЦЕНКИ
ЭФФЕКТИВНОСТИ НЕКОТОРЫХ ГТУ**

*Очков В.Ф.¹, Устюжанин Е.Е.^{*1}, Знаменский В.Е.¹, Рыков С.В.², Рыков В.А.²*

¹*МЭИ, Москва, Россия, ²СПбГУИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

**evgust@gmail.com*

Выполнен анализ Интернет-ресурсов, которые содержат такую информацию, как: (i) данные о теплофизических свойствах $R = (\rho, h, s, \dots)$ веществ; (ii) численные данные об энергетических критериях Z энергоустановок. Показано, что в настоящее время типичными являются Интернет-ресурсы, которые разработаны в ряде организаций (ОИВТ РАН, Стандартиформ, НИСТ и др.) и имеют форму текстовых файлов. Например, такой файл содержит табулированные свойства R и не использует программное обеспечение (ПО) для вычисления этих свойств. Известны ресурсы, позволяющие клиенту реализовать ряд опций. К последним относятся: (i) введение граничных условий, $Y = (p, T)$, по которым должно вычисляться свойство R ; (ii) вычисление значения R с помощью ПО в форме «exe-file». В этом случае программа является закрытой для пользователя: в ПО отсутствует такая опция как «копирование математической формулы», используемой для расчета R . Рядом исследователей, включая авторов этого доклада, предлагается ПО, предназначенное для расчета свойств R , и имеющее форму открытого интерактивного (OS) Интернет-ресурса. Вычислительная часть OS-ресурса связана: (i) с формулой или уравнением состояния (УС), по которым вычисляется свойство R ; (ii) с Mathcad программой Code_1(R, Y). Интерактивная часть OS-ресурса опирается на информатику и Интернет-технологии.

Нами анализируются методические приемы и инструменты, которые можно привлечь для создания OS-ресурса и которые дают возможность: (i) разместить OS-ресурс на удаленном сервере; (ii) реализовать для клиентов ряд новых опций. К последним относятся, например, копирование математической формулы/УС или кода в целом. Рассматриваются OS-ресурсы, которые ориентированы на совместное использование: (ii) программных кодов, предназначенных для проектирования энергоустановок; (ii) OS-ресурсов, позволяющих вычислять свойства R в заданных точках цикла. Обсуждаются результаты, полученные на основе этих ресурсов, в том числе данные о внутреннем КПД, $Z_1(R, Y)$, для некоторых газотурбинных установок (ГТУ), здесь: $Y = (Y_1$ — температура на входе в турбинный блок, Y_2 — степень повышения давления в компрессорном блоке). Выполнена оптимизация целевой функции $Z_1(R, Y)$ применительно к ГТУ.

**О ВАЖНОСТИ МНОГОУРОВНЕВОГО ОПИСАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ
ОБЪЕКТОВ В ОНТОЛОГИЯХ ДЛЯ ИНТЕГРАЦИИ
ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ В НЕОРГАНИЧЕСКОМ
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ**

Дударев В.А., Киселева Н.Н.*

ИМЕТ РАН, Москва, Россия

**vic_dudarev@mail.ru*

В последние годы популярным становится использование онтологий (на OWL) для описания предметных областей и создания фундамента для интеграции тематических информационных систем (ИС). Например, в неорганическом материаловедении известны несколько онтологий, использующихся для консолидации информации [1, 2]. Одним из их существенных недостатков является неоправданное упрощение описания самого рассматриваемого вещества (или материала).

Важность многоуровневого описания химического объекта показывается на примере разработанных в ИМЕТ РАН ИС. ИС «Диаграмма» (<http://diag.imet-db.ru>) описывает фазовые диаграммы двойных и тройных химических систем. В другой ИС «Кристалл» свойства описываются на других уровнях детализации химических объектов: температура плавления описывается на уровне вещества (или соединения), а твердость — на уровне информации о его кристаллической структуре [3].

Таким образом, разрабатывая онтологию предметной области для интеграции ИС по свойствам неорганических веществ, необходимо учесть возможность определения свойств на различных уровнях описания химических объектов и обеспечить автоматическое сопоставление свойств, указанных на верхних уровнях иерархии, с текущим химическим объектом.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 17-07-01362, 18-07-00080. Работа выполнялась по государственному заданию № 007-00129-18-00.

1. Ashino T. Materials ontology: an infrastructure for exchange materials information and knowledge // *Data Science Journal*. Volume 9. 8 July 2010. P. 54-61.
2. Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Серебряков В.А., Шиолашвили Л.Н. Интеграция данных по свойствам веществ и материалов на основе онтологического моделирования предметной области // *Труды XV Всероссийской объединенной конференции «Интернет и современное общество» (IMS-2012)*. Санкт-Петербург, 2012. С. 38-47.
3. Дударев В.А. Интеграция информационных систем в области неорганической химии и материаловедения. М.: URSS, 2016. 314 с.

**МЕТОДЫ ИНТЕГРАЦИИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ
ОНТОЛОГИЙ**

Косинов А.В., Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**adilbek@mail.ru*

Предложено применение онтологий для описания метаданных интегрируемых распределенных источников и использование наборов файлов формата JSON для хранения основного содержания теплофизических данных [1]. Для организации управления данными такой двухслойной системы привлечены инструментарии Apache Spark [2] из стека технологий Больших Данных.

Проведено исследование ряда существующих платформ по интеграции данных, основанных на аналогичных методах [3–5]. Авторы пришли к выводу об отсутствии платформ, полностью удовлетворяющих специфике научных данных, хотя ряд элементов и технических решений достойны внимания и в будущем могут использоваться для целей интеграции теплофизических данных.

Представлены тестовые результаты разработанного инструментария интеграции при работе с базой данных ТЕРМАЛЬ. Продемонстрированы этапы подготовки данных и их конверсии в новый формат.

1. Erkimbaev A.O., Zitserman V.Yu., Kobzev G.A., Kosinov A.V. Standardization of Storage and Retrieval of Semi-structured Thermophysical Data in JSON-documents Associated with the Ontology. АНАЛИТИКА И УПРАВЛЕНИЕ ДАННЫМИ В ОБЛАСТЯХ С ИНТЕНСИВНЫМ ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ, Сборник научных трудов XIX Международной конференции DAMDID/RCDL'2017, 10-13 октября 2017г., г.Москва, МГУ, Россия.
2. Apache Spark, <http://spark.apache.org/docs/>.
3. Open Semantic Framework (OSF), <http://opensemanticframework.org/>.
4. MOMIS DataRIVER, <http://www.datariver.it/data-integration/momis/>.
5. Karma: A Data Integration Tool, <http://usc-isi-i2.github.io/karma/#pub>.

ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ НЕОРГАНИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В.*

ИМЕТ РАН, Москва, Россия

**kis-japan@mail.ru*

В последние годы в развитых странах были выдвинуты и поддержаны правительствами инициативы, направленные на организацию инфраструктуры доступа к данным о материалах. В 2011 г. в США была начата разработка проекта, названного Materials Genome Initiative [1]. В 2014 г. National Data Service объявил о проекте разработки репозитория для хранения экспериментальных и расчетных данных [2]. В 2015 г. ЕС начал работы по программе Novel Materials Discovery Laboratory [3]. В Японии [4], Китае [5] и Индии [6] были разработаны аналогичные программы. На выполнение вышеуказанных проектов выделены сотни миллионов долларов. Однако ожидается, что экономический эффект от использования разрабатываемых информационных систем намного превысит вложенные средства.

Предпосылкой для создания собственной информационной инфраструктуры для материаловедения в России является опыт ИМЕТ РАН в разработке и интеграции БД по свойствам неорганических веществ и материалов, доступных из сети Интернет [7], также методов и программ для компьютерного конструирования новых веществ и материалов, основанных на использовании технологий data mining [8].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты №№ 17–07–01362, 18–07–00080. Работа выполнялась по государственному заданию № 007–00129–18–00.

1. Materials Genome Initiative. <https://www.mgi.gov> — (visited on 23.03.2018).
2. The Materials Data Facility. <https://materialsdatafacility.org> — (visited on 23.03.2018).
3. The Novel Materials Discovery Laboratory. <http://nomad-lab.eu> — (visited on 23.03.2018).
4. Center for Materials Research by Information Integration. <http://www.nims.go.jp/eng/research/MII-I/index.html> - (visited on 23.03.2018).
5. Lu X.-G. // Sci. Bull. 2015. V. 60. N. 22. P.1966.

6. First National Conference on Mapping the Materials Genome. Ed. V. Kumar, G. Roy, V.K. Jayaraman, S. Sukumar and N. Sukumar. New Delhi: Group Excel India, 2013.
7. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В. // Теплофизика высоких температур. 2016. Т.54. N.2. С. 228.
8. Базы данных ИМЕТ РАН. <http://www.imet-db.ru> - (дата обращения: 23.03.2018).

ТЕРМОДИНАМИКА ИСПАРЕНИЯ ТРИФТОРИДА ИТТРИЯ В ФОРМЕ МОЛЕКУЛ YF_3 И Y_2F_6

*Горохов Л.Н.,¹ Осина Е.Л.,*¹ Ковтун Д.М.²*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МГУ, Москва, Россия

*j-osina@yandex.ru

В связи с проводящимися работами по получению надежных термодинамических данных галогенидов иттрия выполнены новые расчеты функций для YF_3 и Y_2F_6 в газовой фазе с привлечением квантово-химических расчетов методами MP2 и CCSD(T).

В результате обработки литературных данных по давлению пара трифторида иттрия с использованием новых термодинамических функций молекул YF_3 получено уточненное значение энтальпии сублимации трифторида иттрия в форме мономера и рассчитана энтальпия образования YF_3 (г). Проведены квантово-химические расчеты молекул YF_3 и Y_2F_6 , из которых рассчитана энергия диссоциации димерных молекул на две мономерные. С использованием этих данных найдена энтальпия сублимации трифторида иттрия в форме димера и рассчитана энтальпия образования Y_2F_6 (г). Рассчитан состав пара трифторида иттрия: отношение давлений Y_2F_6 и YF_3 в интервале 1400–3000 К увеличивается от 2×10^{-4} до 2×10^{-2} . Полученные термодинамические и термохимические величины введены в базу данных программного комплекса ИВТАНТЕРМО.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ТРИХЛОРИДА ИТТРИЯ И ЕГО ДИМЕРА

*Горохов Л.Н.,¹ Осина Е.Л.,*¹ Осин С.Б.²*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МГУ, Москва, Россия

*j-osina@yandex.ru

Выполнен критический анализ экспериментальных и теоретических данных по структуре и частотам колебаний молекул трихлорида иттрия и его димера. Выбраны значения молекулярных постоянных и рассчитаны термодинамические функции. В результате обработки литературных данных по давлению пара трихлорида иттрия с использованием новых термодинамических функций молекул YCl_3 получено уточненное значение энтальпии сублимации трихлорида иттрия в форме мономера и рассчитана энтальпия образования YCl_3 (г). С использованием литературных данных по составу пара при температуре 1312 К найдена энтальпия сублимации трихлорида иттрия в форме димера и вычислена энтальпия образования Y_2Cl_6 (г). Рассчитан состав пара трихлорида иттрия в температурном интервале между 1317 и 1646 К: отношение давлений Y_2Cl_6 и YCl_3 увеличивается от 0,15 до 0,21. Полученные величины добавлены в базу данных программного комплекса ИВТАНТЕРМО.

**ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ ВЫСОКОЧИСТОЙ РТУТИ В
ВАКУУМЕ И АТМОСФЕРЕ КИСЛОРОДА. ЭКСПЕРИМЕНТ**

*Фокин Л.Р.,*¹ Алмагиров Б.Б.,² Коков З.А.,² Коротков П.К.,²
Элимханов Д.З.³*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²КБГУ, Нальчик, Россия, ³ЧГУ, Грозный, Россия

*lfokin@mail.ru

Эксплуатация множества приборов и устройств с ртутью осуществляется в самых различных условиях, поэтому изучение влияния газовой среды и паров на теплофизические свойства Hg остается актуальной задачей. Но в литературе отсутствуют достаточно надежные данные, позволяющие однозначно судить о степени влияния кислорода на поверхностное натяжение (ПН) ртути [1]. В связи с этим в работе ставится задача экспериментального изучения влияния кислорода на ПН высокочистой ртути при комнатной температуре.

В опытах использовалась ртуть марки Р-О (99,9997 % Hg). Перед измерениями ПН методом большой капли ртуть подвергалась высоковакуумной дистилляции и «отгонке» ее в стеклянные ампулы, запаиваемые затем на измерительную ячейку. Для исключения распыления ртути и контакта ее с атмосферным воздухом внутри ампулы ртуть блокировалась тонкой стеклянной перегородкой, а также закладывался металлический «боек» для последующего вскрытия ампулы с Hg внутри измерительной ячейки. Точно также готовилась и стеклянная ампула емкостью около 0.2 литра, которая после термобработки в высоком вакууме заполнялась высокочистым кислородом и запаивалась на измерительную ячейку.

В работе приведены результаты измерения ПН ртути при $T=300$ К, полученные в непрерывном режиме в вакууме (1180 мин) и атмосфере кислорода (1460 мин) на одной и той же поверхности капли Hg. Из них следует, что в вакууме ПН Hg составляет 475 ± 4 мН/м и остается стабильным за время измерений в вакууме. После напуска кислорода в измерительную ячейку и началом экспонирования поверхности Hg в кислороде ($P \sim 10^5$ Па), ПН ртути быстро понижается до 360 мН/м и в дальнейшем остается постоянным и равным около 330 мН/м.

В работе даются возможные объяснения полученным результатам, а также их обсуждение и сопоставление с литературными данными.

-
1. Kozin, L.F and Hansen, S.C. Mercury Handbook: Chemistry, Applications and Environmental Impact // Published by the Royal Society of Chemistry. 2013. S. 324.

ВЛИЯНИЕ НЕСТАБИЛЬНОСТИ НА КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ТЕПЛОЕМКОСТИ НАНОФЛЮИДА ЭТАНОЛ+АЛМАЗ

Абдулагатов И.М.,*¹ Полихрониди Н.Г.,² Батырова Р.Г.²

¹ДГУ, Махачкала, Россия, ²ИФ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

*ilmutdina@gmail.com

Глубокое понимание термодинамических свойств наножидкостей может привести к заметным улучшениям их промышленного применения в самых различных областях. Однако, практическое применение наножидкостей при высоких температурах или других неблагоприятных условиях окружающей среды, например, высокое рН-состояние, соленость, связано с рядом проблем. Например, при использовании наножидкостей для повышения нефтеотдачи скважин часто возникают трудности, связанные с их стабилизацией [1]. На свойства наножидкостей сильное влияние оказывает взаимодействие базовой жидкости с твердыми наночастицами (например, смачивание, гидрофильные и гидрофобные свойства, структура переходной зоны между объемной жидкостью и твердой поверхностью наночастицы и т.д.). Для стабилизации наножидкостей часто используются поверхностно-активные вещества (ПАВ). В тоже время, их влияние на измеряемые свойства наножидкости все еще недостаточно изучено. Например, термическое разложение ПАВ приводит к дестабилизации наножидкостей и, тем самым, значительно влияет на их свойства. Таким образом, нестабильность делает наножидкость неэффективной для их практического применения и часто приводит к непредсказуемым результатам. Среди различных факторов, которые дестабилизируют наножидкости, чрезвычайно важно влияние температуры [1]. В предлагаемой работе исследовано влияние термической неустойчивости на критическое поведение наножидкости этанол + алмаз (с размерами наночастиц алмаза 3-10 нм). Экспериментально установлено, что при температурах выше 500 К термическая дестабилизация наножидкости полностью изменяет температурное поведение теплоемкости. Например, температура фазового перехода наножидкости значительно смещается в сторону более высоких температур по сравнению с чистым этанолом. Кроме того, изохорная теплоемкость, которая в критической точке чистого этанола имеет сингулярность, для наножидкости сглаживается.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант №16-08-00536 и №18-08-00500.

1. McElfresh P., Wood M., Ector D. // SPE 154758, SPE Int. Oilfield Nanotechnology Conference, Noordwijk, The Netherlands. 12-14 June. 2012. P. 1.

ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ ЛИТИЕВЫХ СПЛАВОВ: СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ (ОБЗОР)

Алчагиров Б.Б.,* Кясова О.Х., Узденова А.Н.

КБГУ, Нальчик, Россия

*boris@alchagirov.ru

Интерес к изучению сплавов лития вызван возможностью использования их в качестве электродов в батареях с высокой плотностью энергии и термоэлектрических преобразователях, а также как перспективных материалов для разработки и применения теплоносителей в ядерных энергетических установках на быстрых нейтронах и других областях новой техники и технологии. В связи с этим имеется потребность в получении достоверной информации о теплофизических свойствах сплавов с участием лития. В настоящей работе ставится задача дать краткий обзор состояния исследований поверхностного натяжения

(ПН) — одного из важнейших энергетических характеристик поверхности вещества, для рассматриваемого класса материалов.

Анализ имеющихся в литературе результатов исследований концентрационных зависимостей ПН литиевых сплавов показывает, что ПН изучено лишь для десятка бинарных систем, в числе которых Al-Li, Bi-Li, Ga-Li, In-Li, Sn-Li, Pb-Li, Zn-Li и др. Исследования же ПН тройных сплавов с участием лития только разворачиваются [1, 2]. На наш взгляд, такое состояние исследований объясняется тем, что изучение физико-химических свойств литиевых сплавов является весьма трудной экспериментальной задачей, начиная с проблем синтеза и гомогенизации образцов рассматриваемого класса объектов, а также самих измерений.

Таким образом, из анализа исследований ПН литиевых сплавов следует, что:

- 1) большинство концентрационных зависимостей ПН литиевых сплавов в основном изучены в виде малых добавок лития к металлам;
- 2) значительная доля имеющиеся в литературе концентрационных зависимостей ПН литиевых сплавов построены лишь по нескольким экспериментальным точкам;
- 3) в рассмотренных сплавах добавки лития к легкоплавким р-металлам понижают ПН металла-растворителя, т.е. проявляют поверхностную активность, которая тем больше, чем больше ПН металла-растворителя в сравнении с ПН лития.

-
1. Trybula M.E., Gancarz T., Gasiior W.// Fluid Phase Equilibria. V.421. P. 39–48. 2016.
 2. Alchagirov B.B., Dyshekova F.F.// High Temp. V.54. No.6. P. 815–819. 2016.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЖИДКОСТЕЙ. НАДЕЖДЫ И РЕАЛЬНОСТЬ

Рудяк В. Я.

¹НГАСУ, Новосибирск, Россия, ²СФУ, Красноярск, Россия

valery.rudyak@mail.ru

Интерес к наножидкостям, родившийся четверть века тому назад, неуклонно продолжает расти. Связано это, с одной стороны, с уже существующими приложениями наножидкостей (в парфюмерной и косметической промышленности, в биомедицинских технологиях, при создании новых материалов и т.д.) [1]. С другой стороны, бум исследований наножидкостей был инициирован в значительной мере ожиданиями различных теплофизических их применений (в качестве теплоносителей, хладагентов и т.п.). Все это стимулировало активное изучение теплофизических свойств наножидкостей. Неожиданно полученные результаты оказались чрезвычайно противоречивыми и породили множество спекуляций. Только сегодня достигнута определенная ясность относительно особенностей теплофизических свойств наножидкостей.

В данной работе систематически обсуждаются эти свойства. Приводятся и анализируются как экспериментальные данные, так и данные молекулярно-динамического моделирования, полученные непосредственно автором и его группой. Показано, что теплофизические свойства наножидкостей не описываются классическими теориями, объясняются причины такого поведения. Изучена структура наножидкости. Формулируются механизмы, отвечающие за вязкость и теплопроводность.

Работа выполнена при частичном финансировании РФФИ (гранты № 17-01-00040, № 17-58-45023) и РНФ (проект № 17-79-20218).

-
1. Рудяк В.Я., Минаков А.В. Современные проблемы микро- и нанофлюидики. Новосибирск: Наука, 2016.

ГРАФИТИЗАЦИЯ НАНОАЛМАЗА ПРИ НАГРЕВАНИИ И ОБЛУЧЕНИИ*Закатилова Е.И.,* Ефремов В.П.**ОИВТ РАН, Москва, Россия***ei.zakatilova@mail.ru*

Наноалмазы интересный физический объект привлекательный для многих промышленных применений. В основном наноалмазы получают в промышленных условиях как продукт детонации углеродных взрывчатых веществ с отрицательным кислородным балансом. Размеры детонационных алмазов (ДНА) зависят от организации процесса взрыва. При взрыве в инертной атмосфере продукты содержат наноалмазы. При взрыве в водной среде – микроалмазы.

В настоящей работе исследовался процесс графитизации и тепловая устойчивость детонационных нано и микроалмазов. Полученные данные показывают широкий температурный диапазон графитизации частиц ДНА и зависимость графитизации от размера частиц. Показана высокая тепловая стабильность микроалмазов. Выявлено влияние скорости тепловой обработки на размер наноалмазных конгломератов.

Анализ литературы показывает, что процессы графитизации происходят при радиационном облучении. В зависимости от типа и дозы облучения в алмазе могут образовываться точечные дефекты, аморфная и графитовая фаза. Отжиг облученных образцов показал восстановление дефектной структуры до идеальной решетки и выделение запасенной энергии.

С появлением мощных лабораторных источников излучения (фемтосекундный лазер) появилась возможность получать наноалмазы облучением углеродосодержащих сред. Сегодня эта возможность определяет возросший интерес к теплофизическим свойствам наноалмазов.

ИЗМЕНЕНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ПРОСТОГО ВЕЩЕСТВА ПРИ УМЕНЬШЕНИИ РАЗМЕРА НАНОСИСТЕМЫ*Магомедов М.Н.**ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия**mahmag4@mail.ru*

Разработанная ранее в [1] статистическая трехфазная модель простого вещества обобщена на случай нано-системы. На основе парного потенциала межатомного взаимодействия Ми-Леннард-Джонса получены аналитические выражения для свободной энергии Гельмгольца и уравнения состояния работоспособные при произвольных значениях плотности, температуры и числа атомов в системе.

Расчеты уравнения состояния аргона показали, что при уменьшении числа атомов в системе S-петля на изотерме уравнения состояния для фазового перехода (ФП) кристалл-жидкость (К-Ж) уменьшается, и при определенном числе атомов (N_0) S-петля ФПК-Ж исчезает. Показано, что величина N_0 увеличивается при отклонении формы нано-системы от наиболее энергетически оптимальной формы. С ростом температуры на изотерме величина N_0 увеличивается. В кластере из $N < N_0$ атомов ФПК-Ж уже нет.

При уменьшении числа атомов S-петля для ФП жидкость-газ (Ж-Г) также уменьшается. Параметры критической точки для ФПЖ-Г с уменьшением числа атомов изменяются: критическая температура и давление уменьшаются, а критический удельный объем возрастает.

Ранее, как в экспериментах, так и при компьютерном моделировании, отмечалось, что с уменьшением размера нано-системы наблюдается как сближение размерных зависимостей

температур плавления и кристаллизации, так и уменьшение удельной теплоты и удельного скачка объема при плавлении. Исходя из этих фактов, и изучая экстраполяцию данных размерных зависимостей на малые размеры, в [2] было указано на возможное исчезновение ФПК-Ж при уменьшении числа атомов в нано-системе. В данной работе показано, что это исчезновение S-петля ФПК-Ж обусловлено ростом доли делокализованных атомов при уменьшении размера нано-системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта No 16-03-00041_а и Программы Президиума РАН (программа No I.13).

1. М.Н. Магомедов. Вестник Московского Гос. Технического Университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки, 2013, 2, 28 – 42.
2. М.Н. Магомедов. Журнал Технической Физики, 2014, 84, 5, 46–51.

УРАВНЕНИЕ ИЗОТЕРМЫ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Калажожов З.Х., Калажожов Х.Х., Шериева Э.Х.*

КБГУ, Нальчик, Россия

**khh49@mail.ru*

В [1] из анализа экспериментальных данных по изучению зависимости поверхностного натяжения (ПН, $\sigma(x)$) от состава расплава бинарных металлических систем, было предложено уравнение изотермы ПН

$$\sigma(x) = \beta \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x} + \sigma_A(1-x) - \sigma_B x, \quad (1)$$

где β и F — независимые от состава параметры уравнения (1), σ_A и σ_B — ПН чистых компонентов системы $A-B$, x — термодинамическая концентрация второго компонента системы.

Для доказательства справедливости (1) для бинарных систем с монотонным изменением ПН в зависимости от состава, его переписываем в виде линейной функции

$$y(x) = \frac{(1-x)x}{\Delta\sigma(x)} = \frac{1}{\beta(F-1)} + \frac{1}{\beta}x, \quad (2)$$

Здесь

$$\Delta\sigma(x) = \sigma(x) - \sigma_A(1-x) - \sigma_B x, \quad (3)$$

где $\sigma(x)$ — ПН расплава состава x , измеренная в эксперименте.

Прямая (2) построена с использованием экспериментальных данных $\sigma(x)$ для бинарных систем: 1 — щелочных металлов; 2 — р-металлов; 3 — р-металл+щелочной металл; 4 — тугоплавкий металл+р-металл. Для всех этих систем выражение (2) выполняется удовлетворительно и показано, что оно описывает все виды экспериментальных изотерм ПН бинарных систем с монотонным изменением ПН с высокой точностью — допускаемые относительные отклонения от эксперимента около 1%.

Высокая точность описания экспериментальных изотерм ПН уравнением (1) позволяет построить методики прогнозирования поверхностных свойств бинарных и тройных систем с минимальным количеством опорных измерений.

1. Калажиков Замир Х., Зихова К.В., Калажиков З.Х., Калажиков Х.Х., Таова Т.М. Расчет изотерм поверхностного натяжения расплавов многокомпонентных металлических систем. // ТВТ. - 2012. - Т.50 №3. - С.469-472.

РАЗМЕРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ТЕМПЕРАТУР ПЛАВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МОЛИБДЕНА

Ахмедов Э.Н.

ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

aen-code@yandex.ru

На основании RP-модели, формализм которой представлен в [1], рассчитано уравнение состояния (P) нанокристалла молибдена. Межатомное взаимодействие описывалось парным потенциалом Ми-Лен-нард-Джонса, параметры которого были определены нами путем подгонки под уравнение состояния, модуль упругости и коэффициент теплового расширения макрокристалла молибдена [2].

Исходя из критерия Линдемманна, при изобарических условиях ($P = 0$) рассчитана температура плавления (T_m) для нанокристаллов с различными размерами и формой поверхности. Оказалось, что величина T_m уменьшается при уменьшении числа атомов (N) в нанокристалле, причем это уменьшение идет заметнее при отклонении формы от наиболее энергетически оптимальной (для RP-модели это куб).

Поверхностное давление сжимает нанокристалл, и для того чтобы соблюсти изобаричность $P = 0$ мы должны увеличить межатомное расстояние, что облегчает плавление нанокристалла.

Для RP-модели кривые $T_m(N, P = 0)$ заканчиваются при N_{cr} – минимально возможном размере нанокристалла. Для куба $N_{cr} = 10$, и N_{cr} увеличивается при деформации формы нанокристалла. Если полагать, что значение N_{cr} это размер кристаллического зародыша с данной формой поверхности при $P(N_{cr}) = 0$, то можно получить размерную зависимость для температуры начала кристаллизации T_{cr} . Экстраполяция изобарической зависимости $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}}) = T_{cr}(N_{cr}^{-\frac{1}{3}})/T_m(\infty)$ на макрокристалл ($N_{cr}^{-\frac{1}{3}} = 0$) показала, что значение $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}} = 0)$ равно 0,713 для стержневидных и 0,857 для пластинчатых форм нанокристалла. Это согласуется с правилом Тарнбулла, что позволяет утверждать, что полученная зависимость $T_{cr}^*(N_{cr}^{-\frac{1}{3}})$ описывает размерную зависимость температуры начала кристаллизации Мо при $P = 0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант No 16-03-00041_a) и Программы Президиума РАН (программа No I.13).

-
1. М.Н. Магомедов. Кристаллография, 2017, 62, 3, 487-504.
 2. E.N. E.Akhmedov. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2018, 121, 62-66.

ОБОБЩЁННАЯ МОДЕЛЬ СОПРОТИВЛЕНИЯ КАПИЦЫ

Хвесьюк В.И.

МГТУ, Москва, Россия

khvesyuk@bmstu.ru

Проблема развития теории сопротивления Капицы между твёрдыми телами в настоящее время особенно актуальна в связи с развитием нанотехнологий, где эти сопротивления играют важную, а иногда определяющую роль в переносе тепла. Теория акустического несоответствия (АММ) этого явления развита в [1, 2]. Однако, в этой модели допущен ряд ограничений, не учитывающих важные свойства акустических волн, распространяющихся в твёрдых телах. 1) Учтены только продольные волны. 2) Не учтено, что при преломлении и отражении акустических волн любого типа одновременно возникают как продольные, так и поперечные волны [3, 4]. 3) Не учтено явление полного внутреннего отражения, что вносит заметный вклад в сопротивление Капицы. Это существенно изменяет постановку задачи, в частности, граничные условия на поверхности контакта (интерфейсе).

В представленной работе построена модель, учитывающая все указанные свойства акустических волн. Выполнены расчётные оценки, которые показали хорошее согласие с экспериментальными данными, лучшее, чем в предыдущих работах.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования Российской Федерации, проект 16.8107.2017 / 6.7.

-
1. Халатников И.М. // ЖЭТФ 1952. Т. 22. С. 687.
 2. Little W.A. // Can. J. Phys. 1959. Vol. 37. P. 334.
 3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Физматлит, 2007. 264 с.
 4. Красильников В.А. Крылов В.В. Введение в физическую акустику. М.: Наука, 1984. 403 с.

ПОЛУЧЕНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК МЕДИ С ПОМОЩЬЮ КОМБИНИРОВАННОГО РАЗРЯДА ПРИ АТМОСФЕРНОМ ДАВЛЕНИИ.

*Усенов Е.А.,^{*1,3} Пазыл А.С.,³ Данияров Т.Т.,³ Досболаев М.К.,²
Габдуллин М.Т.,¹ Рамазанов Т.С.²*

¹ННЛОТ, КазНУ им. Аль-Фараби, Алматы, Казахстан, ²НИИЭТФ, КазНУ им. Аль-Фараби, Алматы, Казахстан, ³ИПН и ИТ, Алматы, Казахстан

**yerbolat@physics.kz*

В данной работе был изучен метод получения тонких пленок меди на поверхности кремниевой подложки с помощью комбинирования двух типов разряда при атмосферном давлении: импульсного искрового разряда и плазменной струи при атмосферном давлении (на основе диэлектрического барьерного разряда (ДБР)) в потоке инертных газов He и Ar. В данном случае искровой разряд служил источником мономеров (precursor) и наночастиц малых размеров, которые попадая в область однородного барьерного разряда плазменной струи увеличиваются в размерах (за счет коагуляции или поверхностного роста) и осаждаются на поверхности подложки. Было изучено несколько вариантов расположения электродов искрового разряда. Также были получены динамическая ВАХ комбинированного разряда. Температура поверхности подложки при взаимодействии с комбинированным разрядом была исследована с помощью термопары и сравнена с температурой при искровом разряде. Толщина и изображение поверхности получаемых тонких пленок при разной длительности времени обработки были изучены с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) при разной разрешающей способности. Также был получен

элементный состав поверхности полученных тонких пленок с помощью энергодисперсионной спектроскопии на базе СЭМ. Полученные результаты показали что комбинация импульсного искрового разряда и плазменной струи при атмосферном давлении в несколько раз увеличивает степень осаждения тонких пленок на поверхности подложки.

НАНОРАЗМЕРНЫЕ НЕОДНОРОДНОСТИ В NiO

*Шулятев Д.А.,^{*1} Мухамедов Б.,¹ Пономарева А.В.,¹ Абрикосов И.А.,¹
Божко С.И.,² Ионов А.М.,² Мазилкин А. А.,² Смирнова А. И.,² Волс Б.,³
Швец И. В.³*

*¹МИСиС, Москва, Россия, ²ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия, ³CRANN, Дублин,
Ирландия*

**shulyatev@mail.ru*

Целью данной работы было изучение неоднородности монокристаллов NiO (и Ni_{1-x}Li_x)O, выращенных методом бестигельной зонной плавки. Различные типы неоднородностей в диапазоне от миллиметровых размеров до наноразмерных наблюдались с использованием рентгеновской дифракции, электронной микроскопии, LEED, AFM и STM/STS. В частности, AFM/STM исследования выявили необычную гранулированную структуру на поверхности NiO (100) с типичным размером гранул в несколько нанометров. Наногранулированная структура была также изучена методами низкоэнергетической электронной дифракции (LEED) и просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ). Оценка размера когерентной области по ширине LEED-пятен и ТЕМ-изображений хорошо согласуется с данными AFM-STM. Первопринципные расчеты показали, что возможной причиной формирования наногранулированной структуры является искажения кристаллической решетки вокруг вакансии Ni. Согласно DFT расчетам, диаметр области атомных смещений вокруг вакансии Ni составляет 1,2 нм, что очень близко к размеру гранул, наблюдаемых в STM.

ЭМПИРИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ЧИСТЫХ ВЕЩЕСТВАХ

Прокофьев С.И.

ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия

prokof@issp.ac.ru

В рамках модели, рассматривающей границы зерен как однородный жидкоподобный слой в твердой матрице, получены эмпирические уравнения, описывающие температурные зависимости усредненного поверхностного натяжения высокоугловых границ зерен в чистых веществах. Предлагаемые выражения связывают поверхностное натяжение границ зерен с температурой плавления, энтальпией плавления и молярным объемом чистых элементов в твердом состоянии при температуре плавления. На их основе также получены эмпирические выражения, связывающие поверхностное натяжение границ зерен с поверхностными напряжениями элементов в твердом и жидком состояниях при температуре плавления. Предложенные эмпирические соотношения могут быть полезны для количественной оценки усредненного поверхностного натяжения высокоугловых границ зерен в элементарных твердых телах при не слишком низкой гомологичной температуре. Приведены параметры температурных зависимостей среднего поверхностного натяжения

высокоугловых границ зерен в 57 элементах. Оцененная ошибка определения величин поверхностного натяжения границ зерен сопоставима с ошибками их экспериментального определения.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ НАНОПЛЕНОК И НАНОНИТЕЙ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

Баринов А.А., Лю Б.*

МГТУ, Москва, Россия

**barinovE6@bmstu.ru*

Нанопленки и нанонити кремния и германия являются классическим примером структур, в которых средняя длина свободного пробега переносчиков тепла (фононов) сопоставима с наименьшим размером образца (толщина пленки, диаметр нити). Данное обстоятельство приводит к возникновению так называемого размерного эффекта – зависимости свойств от характерного размера и геометрии образца [1, 2]. Для оценки влияния размера на теплофизические свойства широко применяется метод, основанный на решении транспортно-уравнения Больцмана в приближении времени релаксации [3]. При этом для проведения конкретных количественных расчетов необходимы, во-первых, закон дисперсии (зависимость частоты фононов от волнового вектора), а во-вторых, времена свободного пробега фононов между последовательными актами взаимодействий.

В данной работе дисперсионные соотношения получены на основе решения уравнения упругости сплошной среды для пленки и цилиндра [4, 5] с свободными границами.

Время свободного пробега определялось согласно правилу Маттиссена как комбинация 1) времени между последовательными взаимодействиями фононов (трехфононные взаимодействия), 2) времени рассеяния на неоднородностях кристаллической решетки и 3) времени между последовательными взаимодействиями с границей образца [3].

В результате проведенных расчетов получены зависимости теплоемкости и теплопроводности нанопленок и нанонитей кремния и германия от температуры и размера структуры. Представленные результаты могут быть использованы для оценки процессов теплопереноса в перспективных полупроводниковых устройствах.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования Российской Федерации, проект 16.8107.2017 / 6.7.

-
1. Хвесьюк В.И. // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. Вып. 5.
 2. Khvesyuk V.I., Skryabin A.S. // High Temp. 2017. Vol. 55 (3). P. 434.
 3. Khvesyuk V.I., Barinov A.A. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. Vol. 891. P. 012352.
 4. Викторов И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Рэлея и Лэмба в технике. М. : Наука, 1966.
 5. Физическая акустика. Том 1. Ч. А. / Под ред. У. Мэзона. М. : Мир, 1966.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПОГЛОЩАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ТОНКИХ ПЛЁНОК ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ В СРЕДНЕМ ИК ДИАПАЗОНЕ

Скрябин А.С., Веснин В.Р., Цыганков П.А., Чирков А.Ю.*

МГТУ, Москва, Россия

**terra107@yandex.ru*

В настоящее время повышение коэффициента поглощения материалов A_λ в среднем диапазоне ИК излучения весьма актуально для задач создания перспективных болометрических датчиков и интенсификации радиационного теплообмена. В качестве устройств-абсорберов ИК излучения могут выступать, например, тонкоплёночные (с характерными толщинами $h = 10 \dots 100$ нм) покрытия [1] на различных подложках. При этом используются плёнки металлов, полупроводников, а также их оксиды, нитриды и т.д. [2].

С использованием теории Друде [3] проведены расчёты оптических свойств металлических материалов (Ti, Cr и т.д.). В результате определены спектральные коэффициенты преломления n_λ , экстинкции k_λ и поглощения A_λ при $\lambda = 2, 5 \dots 15$ мкм и $T = 300 \dots 1000$ К.

Получение образцов тонкоплёночных абсорберов на основе оксидов титана проведено с помощью ионно-пучкового распыления Ti мишени в смеси аргона и кислорода при давлении газовой смеси около 3 мПа с последующим осаждением атомов на подложке из силикатного стекла. Полученные покрытия подвергались комплексу исследований с целью установления особенностей их структуры и получения данных об их поглощательной способности.

Образцы плёнок имели характерную толщину порядка 600 нм. Исследовались спектры поглощения исходной подложки, а также подложки с покрытием для двух случаев: в случае падения излучения со стороны покрытия и со стороны без плёнки. Для всех исследованных систем зависимости A_λ имеют существенно немонотонный характер с наличием нескольких экстремумов в исследованном диапазоне λ .

Резюмируя результаты исследований, можно утверждать, что применение тонкоплёночных покрытий позволяет достичь средне интегрального поглощения $\bar{A}_\lambda \approx 0,37 \dots 0,39$ в диапазоне $\lambda = 2, 5 \dots 15$ мкм, что в 3...4 раза выше, чем \bar{A}_λ подложки из силикатного стекла.

-
1. Lodenquai J.P. // Solar Energy, Vol. 53. № 2. pp. 209-210.
 2. Jiang B. et al. // ECS Transactions, Vol. 64. № 8. pp. 179-183.
 3. Arnold G.S. // Applied Optics, Vol. 23. №9. pp. 1434-1436.

ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИЦИЙ С НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА МЕТОДАМИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ И РЕФРАКТОМЕТРИИ¹

*Хасанова Р.Р.,^{*1} Жаворонок Е.С.,¹ Шабатин А.В.,² Сенчихин И.Н.²*

¹Московский технологический университет (МИТХТ), Москва, Россия, ²ИФХЭ РАН, лаборатория физикохимии коллоидных систем, Москва, Россия

*khasanova_r@mail.ru

Полимерные нанокompозиты с частицами металлов (в т. ч. серебра) обладают уникальными оптическими, теплофизическими и бактерицидными свойствами, что определяет актуальность их создания и исследования. Одним из интересных видов таких материалов являются нанокompозиты на основе отверждающихся эпоксидных олигомеров (ЭО), в которых наночастицы образуются при восстановлении ионов серебра из его прекурсора (соли). Важным условием формирования такого нанокompозита является растворение прекурсора в олигомерной матрице. Поэтому целью работы является изучение восстановления серебра из его прекурсора (нитрата) в эпоксидных матрицах.

В качестве основных объектов исследования использовали диановый эпоксидный олигомер Epikote 828 с $M_n=375$ производства группы компаний Hexion (США) и полиглицидиловый эфир олигооксипропилентриола Лапроксид 703 с $M_n=732$ и $f_{EP}=2,43$ производства ООО «НПП Макромер». В качестве прекурсора металла использовали нитрат серебра (ч.д.а., Merck). Исследования проводили методами дифференциальной сканирующей калориметрии на приборе DSC Q-100 (TA Instruments, США) в диапазоне 188–473 К в атмосфере аргона при скорости нагрева 10 К/мин и рефрактометрии на приборе УРЛ-1 при 22°C по стандартной методике.

Экспериментальные результаты свидетельствуют, что на скорость восстановления ионов серебра из прекурсора влияют скорость растворения и возможность сольватации молекул нитрата серебра в ЭО. Показана роль природы эпоксидного олигомера при восстановлении Ag^+ в эпоксидной матрице. Проведенные исследования позволяют оптимизировать получение *in situ* стабильных нанодисперсий серебра в олигомерах, на основе которых планируется получение эпоксиаминных нанокompозитов с улучшенными оптическими и иными свойствами.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Проект № 17-08-00630).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ВЯЗКОСТИ НАНОЖИДКОСТЕЙ

*Пряжников М.И.,^{*1,2} Минаков А.В.,^{1,2} Рудяк В.Я.^{1,3}*

¹СФУ, Красноярск, Россия, ²ИТ СО РАН, Новосибирск-90, Россия, ³НГАСУ, Новосибирск, Россия

*arrivent@yandex.ru

Интерес к наножидкостям устойчиво растет два последних десятилетия. Связано это с уже существующими и возможными в будущем их применениями. Так как обычно в приложениях имеют место течения наножидкостей, то определяющую роль играет их вязкость. Несмотря на значительный накопленный экспериментальный материал, здесь все еще продолжаются дискуссии (см., например, обзоры [1–4]). Противоречия связаны с вопросом, зависит ли вязкость наножидкостей от размера частиц, и если зависит, то как [4].

В работе представлены систематические результаты исследования коэффициента вязкости наножидкостей. Всего было изучено несколько десятков наножидкостей на основе воды, этиленгликоля и машинного масла с наночастицами: SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 , ZrO_2 , CuO , Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , алмаз. Объемная концентрация частиц менялась от 0,1 до 8,0%. Размер частиц варьировался от 5 до 150 нм. Наночастицы были приобретены у компаний ОАО «Плазмотерм» (г. Москва) и ООО «Порошковые технологии» (г. Томск, частицы Fe_3O_4 , CuO). Все исследуемые в данной работе наножидкости приготавливались стандартным двухшаговым методом [5].

Измерение коэффициента вязкости наножидкостей проводилось с помощью ротационного вискозиметра Брукфильда DV2T со сменными шпинделями. Использовался также ротационный вискозиметр OFITE-900. Все измерения проведены при температуре 25°C.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФ (проект №17-79-20218).

1. Hosseini S.Sh., Shahrjerdi A., Vazifeshenas Y. // Aust. J. Basic Appl. Sci. 2011. V. 5. No. 10. P. 417.
2. Mahbulul I.M., Saidur R., Amalina M.A. // Int. J. Heat Mass Transfer. 2012. V. 55. P. 874.
3. Murshed S.M.S., Estellé P. // Renew. Sust. Energy Rev. 2017. V. 76. P. 1134.
4. Коча D.Н., Доганай S., Тургут A., Тавман I.Н., Саидур R., Махбул I.M. // Renew. Sust. Energy Rev. 2018. V. 82. P. 1664.
5. Rudyak V.Ya., Minakov A.V., Smetanina M.S., Pryazhnikov M.I. // Dokl. Phys. 2016. V. 61. No. 3. P. 152.

НАНОПОРИСТЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ СУПЕРКОНДЕНСАТОРОВ

Вервикишко Д.Е., Кочанова С.А., Долженко А.В., Школьников Е.И.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**vitkina-darya@yandex.ru*

В качестве электродных структур для суперконденсаторов широко применяются углеродные материалы. Причиной этого является ряд уникальных свойств углерода, таких как, высокая коррозионная стойкость, достаточная электронная проводимость, высокая температурная стойкость, возможность регулировки значений удельной поверхности и других параметров пористой структуры в процессе синтеза. Кроме того, многообразие форм углеродных материалов также позволяет более гибко подходить к выбору электродных материалов суперконденсатора. На энергоёмкость угольного электрода влияют такие свойства углеродного материала как: тип исходного сырья, его дисперсность и элементный состав, режимы предпирилиза и активации, модификация после активации и др. В качестве сырья для активации можно использовать различные материалы: полимеры, нефтяной пек, ископаемый уголь, растительную биомассу (торф, древесину и ее компоненты, скорлупу орехов) и др. Важным условием с технико-экономических позиций является низкая стоимость, доступность и однородность сырья. Для эффективного формирования двойного электрического слоя в суперконденсаторах необходимо обеспечить высокоразвитую поверхность электродных материалов. Именно поэтому одним из самых распространенных электродных материалов является активированный уголь с большой удельной поверхностью. Важную роль играет состояние поверхности углеродного материала (например, наличие поверхностных С-О групп, краевой угол смачивания и другие физико-химические характеристики).

Данная работа посвящена разработке и исследованию высокоэффективных активированных углей из древесины. Проведена обширная работа по определению оптимальных режимов синтеза данных углеродных материалов для достижения высоких удельных элект-

трохимических характеристик суперконденсаторов с водным и органическим электролитами. Показано, что разработанные материалы обладают высокой ресурсной стабильностью. Достигнуто более 1 200 000 циклов заряда-разряда суперконденсатора с электролитом 1М тетраэтиламмония тетрафторборат. Исследована нанопористая структура активированных углей, высказаны гипотезы о влиянии параметров пористой структуры на удельные электрохимические характеристики.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект номер № 14-50-00124).

БИОЦИДНАЯ АКТИВНОСТЬ ГИДРОФОБИЗОВАННЫХ ОЛИГОГЕКСАМЕТИЛЕНГУАНИДИНОВ В ЭПОКСИДНЫХ СИСТЕМАХ

*Косакович Е.О.,¹ Жаворонок Е.С.,¹ Сафонов А.В.,² Сенчихин И.Н.*²*

¹МТУ (МИТХТ им. М.В. Ломоносова), Москва, Россия, ²ИФХЭ РАН, Москва, Россия

*isenchikhin.ras@gmail.com

При длительном использовании антибактериальных и антифунгицидных препаратов у многих бактерий и паразитических грибов появляется резистентность к действующим веществам, что требует постоянного поиска новых противомикробных компонентов. Среди современных биоцидных материалов широкого спектра действия определенный интерес представляет группа олигогексаметиленгуанидинов (ОГМГ), перспективная в качестве добавки в различные полимерные материалы. Цель настоящей работы состояла в модифицировании эпоксиаминных систем производными ОГМГ, а также в исследовании теплофизических свойств и биоцидной активности отвержденных композиций. В качестве объектов были использованы диановый эпоксидный олигомер (ЭО) Epikote 828 с $M_n = 375$ (Hexion, США) и полиглицидиловый эфир олигооксипропилентриола Лапроксид 703 с $M_n = 732$ и $f_{EP} = 2,43$ (ООО «НПП «Макромер», Россия); пальмитат и стеарат ОГМГ, синтезированные из ОГМГ-гидрохлорида с $M_n = 951$ и 0,47 разветвлений на молекулу. Синтез аддуктов солей ОГМГ с ЭО проводили в автоклаве (изб. давление 4 атм) в течение 2 ч. Продукты синтеза вводили в эпоксиаминную смесь и проводили отверждение по разработанному ранее режиму с получением полностью отвержденного полимера. Образцы для исследований (в виде пленок) готовили методом полива. Для систем с различным содержанием ОГМГ в матрице проанализирована эволюция температуры стеклования в процессе отверждения; оценена термостабильность и определены некоторые механические характеристики полимерных продуктов. С использованием МТТ-теста оценена антибактериальная активность полностью отвержденных пленок. Для образцов, выдержанных в течение недели в питательной среде (на основе дрожжевого экстракта, триптона и декстрозы), инокулированной штаммом *P. putida* K12, был выявлен биоцидный эффект. Результаты показали перспективность использования эпоксиаминных полимеров, модифицированных гидрофобизированным ОГМГ, в качестве антибактериальных материалов.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Проект № 18-08-01252А).

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ГАЗА НА ЗАРОЖДЕНИЕ И РОСТ ПЫЛЕВЫХ НАНОЧАСТИЦ В ВЧ ПЛАЗМЕ

**Оразбаев С.А.,^{*1,2} Жумадилов Р.Е.,² Жунисбеков А.Т.,¹ Рамазанов Т.С.,¹
Габдуллин М.Т.,² Досболаев М.К.,^{1,2} Батрышев Д.Г.²**

¹НИИЭТФ, Алматы, Казахстан, ²ННЛОТ, Алматы, Казахстан

*sagi.oralbayev@gmail.com

Тенденция развития наноматериалов уже позволяет наглядно убедиться, что одной из наиболее перспективных областей в нанотехнологии является синтез углеродных наноматериалов. В свою очередь наночастицы — это изолированные твердофазные объекты, размеры которых во всех трех измерениях составляют от 1 до 100 нм. На сегодняшний день изучается много интересных открытий, связанных с физико-химическими характеристиками углеродного наноматериала (УНМ). Это обнаруживает большие возможности применения УНМ в разных областях не только науки, но и в строительстве, энергетике, электронике и т.д. В данной работе для получения углеродных наноматериалов был использован метод химического осаждения из газовой фазы с плазменным усилением (PECVD). Получение углеродных наночастиц осуществляется в плазме высокочастотного разряда 13,56 МГц, согласующим устройством типа L. Данная установка состоит из вакуумной камеры, в которую интегрирована система цилиндрических труб с электродами. Электроды выполнены в виде плоскопараллельных дисков, расположенных на расстоянии 20 мм. Температура в вакуумной камере регулируется системой охлаждения и нагрева с использованием жидкого азота и нагревателя. Таким образом можно варьировать температуру плазмообразующей среды в диапазоне от -20 до 1000 °С. На активных электродах в емкостном разряде индуцируется постоянный ток, напряжение самосмещения которого прямым образом влияет на концентрацию потока электронов в плазме. Для исследования плазмохимического синтеза и формирования наночастиц применяется метод, основанный на измерении напряжения самосмещения VDC. Полученные наночастицы анализируются с помощью электронного сканирующего микроскопа Quanta 3D, делаются микроснимки.

В данной исследовательской работе были синтезированы углеродные наночастицы методом PECVD и выяснилось, что различные параметры, такие как температура в рабочей камере, напряжение самосмещения, давление газа и пр., прямым образом влияют на их формирование. К примеру, стало известно, что в случае повышения температуры с комнатной до 1000 °С время образования наночастиц углерода увеличивается в 4 раза.

1. J. Lin, S. Orazbayev, M. Hénault, Th. Lecas, K. Takahashi and L. Boufendi. Effects of gas temperature, pressure, and discharge power on nucleation time of nanoparticles in low pressure C₂H₂/Ar RF plasmas // Journal of Applied Physics 122, 163302 (2017).
2. L. Boufendi, A. Bouchoule, "Particle nucleation and growth in a low-pressure argon-silane discharge," Plasma Sources Sci. Technol., vol. 3, no. 3, pp. 262, 1994.
3. U. Bhandarkar, U. Kortshagen, S.L. Girshick. Numerical study of the effect of gas temperature on the time for onset of particle nucleation in argon-silane low-pressure plasmas // J. Phys. D: Appl. Phys. 36 (2003) 1399–1408.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ НАНОЭМУЛЬСИЙ
Н-АЛКАНОВ МЕТОДАМИ ДИНАМИЧЕСКОГО И СТАТИЧЕСКОГО
РАССЕЯНИЯ СВЕТА**

*Курьяков В.Н.¹, Иванова Д.Д.*²*

¹*ИПНГ РАН, Москва, Россия, ²РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия*

**ivanovad.97@mail.ru*

В докладе приводятся результаты исследований фазовых переходов (плавление, кристаллизация, ротаторные фазы парафинов) методом динамического и статического рассеяния света в водных эмульсиях индивидуальных парафинов парафинов C₁₉H₄₀, C₂₀H₄₂, C₂₁H₄₄, C₂₃H₄₈, C₂₄H₅₀, C₂₅H₅₂, C₂₆H₅₄, и C₂₈H₅₈ и некоторых бинарных смесях указанных парафинов. Эмульсии приготовлены методом ультразвукового диспергирования без использования поверхностно-активных веществ и оставались устойчивыми в течение года, характерный размер эмульсии около 100 нм. Парафиновые эмульсии – перспективный материал для эффективных теплоносителей (PCM, Phase Change materials).

Используя метод динамического и статического рассеяния света, проведены исследования указанных эмульсий в широком интервале температур. Авторами предложена новая методика определения температур фазовых переходов парафинов основанная на анализе температурных зависимостей интенсивности рассеянного света [1, 2]. Определенные в работе температуры фазовых переходов индивидуальных парафинов хорошо согласуются с имеющимися опубликованными данными.

-
1. V.N. Kuryakov et al 2018 IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 347 012034. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/347/1/012034>.
 2. Д.Д. Иванова, К.И. Киенская, В.Н. Курьяков. Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр., 2017, Т. XXXI, 4 (185), 88-90.

**ЦИФРОВЫЕ СИСТЕМЫ СБОРА И ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ И
УПРАВЛЕНИЯ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКОЙ
УСТАНОВКЕ**

*Куриченко А. А.¹, Горбатов В. И.¹, Ивлиев А. Д.*²*

¹*УГГУ, Екатеринбург, Россия, ²РГППУ, Екатеринбург, Россия*

**ad_i48@mail.ru*

Описана установка, реализующая широко известный метод температурных волн [1], основные функциональные устройства которой работают под управлением компьютера и микроконтроллеров. Установка состоит из оптического квантового генератора (ОКГ), амплитудного модулятора, вакуумной камеры для исследуемого образца, снабженной электротермическим оборудованием и системой подачи газа, а также из измерительных датчиков и цифровой системы обработки сигналов. Модулятор превращает излучение непрерывного ОКГ в поток тепловых импульсов, воздействующих на поверхность плоского образца. В образце возбуждается температурная волна. Работа амплитудного модулятора жестко связана с работой генератора опорного напряжения, формирующего сигнал, позволяющий судить о фазе колебаний теплового потока. Частота модуляции устанавливается по команде компьютера в диапазоне от 1 до 100 Гц и стабилизируется [2]. Температурная

волна проходит через образец. Колебания температуры второй плоской поверхности образца при помощи термодатчика и фотодатчика превращаются в электрические сигналы, которые, пройдя через аналоговые нормирующие цепи, поступают на аналого-цифровой преобразователь (АЦП), а затем в компьютер. Работа нормирующих цепей управляется компьютером [3], благодаря чему апертура АЦП используется эффективно. Компьютер осуществляет Фурье преобразование сигнала и опорного напряжения, что позволяет определить фазовое запаздывание сигнала и его амплитуду. По этим параметрам компьютер рассчитывает температуропроводность и относительную теплоемкость образца. Темп нагрева образца регулируется компьютером, благодаря чему весь процесс измерения протекает в автоматическом режиме.

1. Ивлиев А. Д. // Теплофизика высоких температур, 2009, V. 47. No. 5. P. 771.
2. Векшина О. А., Векшин И. М., Куриченко А. А., Ивлиев А. Д. // Измерительная техника, 2010, No. 6. P. 42.
3. Векшин И. М., Векшина О. А., Куриченко А. А., Ивлиев А. Д. // Измерительная техника, 2012, No. 11. P. 26.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНЫХ ПРОКЛАДОК ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОГО ОБОРУДОВАНИЯ

Сухих А.А., Кузнецов К.И., Скородумов С.В.*

МЭИ, Москва, Россия

**SukhikhAA@mpei.ru*

Объект исследования — теплоотводящие прокладки — отечественные аналоги материалов серии SilPad, GapPad и Bond-Play зарубежного производства, широко представленных на рынке электронного оборудования. Для выполнения поставленной задачи разработана и изготовлена установка по измерению теплопроводности методом плоского слоя при стационарном тепловом потоке. Диапазон работы от уровня азотных температур до +150 °С, кроме того, установка сконструирована таким образом, что на ней могут проводиться измерения при нагрузке образца избыточным давлением до 1200 кПа. С целью исключения тепловых утечек от образца за счет естественной конвекции предусмотрено вакуумирование измерительной ячейки, которое также обеспечивает отсутствие конденсации и замораживания водяного пара из окружающего воздуха внутри ячейки при работе в низкотемпературном диапазоне. Геометрическая конфигурация образцов: диски диаметром 15 мм и толщиной от 0,5 до 5 мм.

Аттестационные опыты проводились на образце из оптического бесцветного стекла марки ТФ1 (ГОСТ 13659-96) с аттестованной характеристикой зависимости теплопроводности от температуры в интервале 50– 500 К. Точность полученных результатов оценивается предельной относительной погрешностью 3% при доверительной вероятности 0,95.

1. Цветков Ф.Ф., Григорьев Б.А. Тепломассообмен: Учебное пособие для вузов. – 2-е изд. испр. и доп. – М.: Изд-во МЭИ, 2005. –550 с.
2. Мереуца Е. В., Бутов Р. А. Исследование теплопроводности для рабочих фторуглеродного состава методом плоского слоя// Потенциал современной науки. 2016. №3. С.23-31.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТИ УГЛЕРОДНОЙ ПЛЕНКИ ПО ДАННЫМ ФОТОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА СПЕКТРОВ ЯРКОСТИ ОТРАЖЕНИЯ ОТ ЕГО ПОВЕРХНОСТИ.

Ермишкин В.А., Минина Н.А., Кудрявцев Е.М., Покрасин М.А.*

ИМЕТ РАН, Москва, Россия

**minina1951@rambler.ru*

На основе метода фотометрического анализа структурных изображений (ФАСИ), который ранее был разработан в ИМЕТ РАН, была предложена процедура определения коэффициента температуропроводности на образцах из фольги исследуемых материалов. С использованием этой методики был проанализирован процесс распространения тепла и получены оценки температуропроводности меди, алюминия и в настоящей работе углерода, в которых возбуждалось неоднородное температурное поле с помощью единичного лазерного импульса, выпущенного из лазера непрерывно действия на углекислом газе, направленного в один из фокусов эллиптической мишени (образца). Поверхность мишени в процессе эксперимента непрерывно записывалась на видеокамеру. Покадровая обработка видеозаписи с выбранной периодичностью методом ФАСИ позволила проанализировать особенности распространения тепла по поверхности мишени и получить количественные характеристики этого процесса. Были получены временные и пространственные локальные характеристики их изменений, т.е. первые и вторые частные производные по времени и координатам, входящие в уравнение теплопроводности, из которого определяли коэффициент температуропроводности материала мишени. Разработанная методика дала возможность непосредственно определять значения коэффициентов температуропроводности в отличие от стандартного метода, основанного на раздельном определении теплопроводности, теплоемкости и плотности. Сравнение полученных значений коэффициентов температуропроводности для углерода с его значениями, вычисленными по справочным данным теплофизических характеристик, показали достаточно хорошее их совпадение. Работа выполнена по государственному заданию №007-00129-18-00 и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 17-08-00098а).

МЕТОДЫ И СРЕДСТВА ИЗМЕРЕНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РАСТИТЕЛЬНЫХ ТКАНЕЙ ОВОЩЕЙ И ФРУКТОВ

Дивин А.Г., Пономарев С.В., Любимова Д.А.*

ТГТУ, Тамбов, Россия

**agdv@yandex.ru*

Теплофизические характеристики растительных тканей овощей и фруктов зависят от их вида и сорта, структуры, содержания воды, а также наличия повреждений вследствие механических воздействий или фитозаболеваний. Последнее обстоятельство позволяет применять тепловые методы неразрушающего и бесконтактного контроля с использованием систем технического зрения в инфракрасной области спектра (8-14 мкм) при разбраковке сельскохозяйственной продукции. Для определения режимных параметров теплового воздействия необходимо знать теплофизические характеристики поверхностных и подповерхностных растительных тканей реального объекта контроля, что возможно с применением как бесконтактных, так и контактных методов измерений.

Для реализации бесконтактных измерений использовался абсолютный метод [1], в котором нагрев поверхности объекта организован при помощи лазера мощностью 0,5 Вт и длиной волны 405 нм через участок поверхности в виде круга в течение нескольких минут.

Для получения первичной информации о температуре поверхности тела применялся тепловизор производства фирмы FLIR модели А35. Программное обеспечение, разработанное в среде LabVIEW 2016, служит для обработки изображения, измерения температуры и расчета теплопроводности, а также коэффициента температуропроводности ткани.

Для определения теплофизических характеристик подповерхностных растительных тканей использовались контактный метод регулярного режима третьего рода [2] и импульсный метод плоского слоя.

Проведенные калибровочные измерения на стандартных образцах позволили установить максимальную погрешность для теплопроводности не более 7 %.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках Соглашения № 14.577.21.0214 (ПНИЭР RFMEFI57716X0214).

1. Пономарев С.В., Мищенко С.В., Дивин А.Г., Вертоградский В.А., Чуриков А.А. Теоретические и практические основы теплофизических измерений. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008.
2. Lyubimova D.A., Ponomarev S.V., Divin A.G. Measurement Techniques. 2015. Т. 57. № 12. С. 1423-1429.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИИ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ Cr-Ni СИСТЕМЫ МЕТОДОМ ФОТОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА СПЕКТРОВ ЯРКОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ

Ермишкин В.А., Михайлов Д.Л., Минина Н.А., Белоусов О.К., Палий Н.А.*

ИМЕТ РАН, Москва, Россия

**minina1951@rambler.ru*

В настоящей работе рассмотрены результаты изучения диффузии хрома и бора в сплаве G 35 (США), в химическом составе которого насчитывалось 12 элементов. Следует отметить, что бор по паспорту сплава не был указан, но его наличие и концентрация были установлены в ходе настоящего исследования методом фотометрического анализа структурных изображений (ФАСИ), разработанном в ИМЕТ РАН. Метод ФАСИ основан на сравнении по дифференциальной схеме спектров яркости отражения видимого света от фрагментов поверхности исследуемого объекта и их изображений до, во время и после нагрева. Исследование выполнялось методом *in situ* в высокотемпературном металлографическом микроскопе. Цифровая фотокамера позволяла в периодическом режиме регистрировать изображение исследуемого фрагмента поверхности образца. Анализ данных, полученных методом ФАСИ, позволил установить временные и радиальные зависимости частных производных концентраций выделенных легирующих элементов первого и второго порядка, входящие в уравнение диффузии. Полный анализ полученных экспериментальных данных позволил получить температурные зависимости коэффициентов диффузии хрома и бора. Полученные значения энергий активации диффузии для этих элементов близки по величине к их оценкам известным из литературных данных.

Работа выполнена по государственному заданию №007-00129-18-00 и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 17-08-00098а).

АЛГОРИТМЫ ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ ПРИ ИЗМЕРЕНИИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТОДОМ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ВОЛН

Черноскутов М.Ю., Ивлиев А.Д., Мешков В.В.*

РГППУ, Екатеринбург, Россия

**mikhail.chernskutov@gmail.com*

В методе температурных волн [1] сведения о теплофизических характеристиках исследуемого вещества содержатся в параметрах первой гармоники температурной волны, прошедшей через образец. Конкретно, основными информационными параметрами соответствующей задачи являются начальная фаза и амплитуда температурной волны. Кроме этих параметров для расчета необходимы еще знания о толщине образца и частоте волны. Данные параметры, как правило, определяются стандартными методами с необходимой точностью.

Аналого-цифровое преобразование сигнала позволяет получить файл, содержащий сведения о колебаниях температуры за несколько периодов температурной волны. Дальнейшая обработка такого сигнала должна обеспечить достаточно точную оценку значений параметров при условии наличия помех и шумов. Оптимальная обработка слабых сигналов содержит операцию преобразования Фурье [2].

Нами используется несколько приёмов для ускорения анализа. Во-первых, при известном априори значении частоты температурной волны [3], устанавливается частота опроса датчиков, позволяющая сформировать файл, содержащий одно и то же количество отсчетов за период. Это позволяет в дальнейшем использовать таблицу синусов и косинусов опорного сигнала, не производя каждый раз их вычисление и экономить время при многократной обработке. Во-вторых, мы используем персональный компьютер с многоядерным процессором, что позволяет разбивать процесс анализа на несколько частей и обрабатывать их параллельно. Затем определяется комплексная амплитуда температурной волны и производится расчет теплофизических характеристик.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты No. 11-08-00275 и No. 14-08-00228).

-
1. Ивлиев А. Д. // Теплофизика высоких температур, 2009, V. 47. No. 5. P. 771.
 2. Ван Трис Г. Теория обнаружения, оценок и модуляции. V/, 1. - М.: «Советское радио», 1972. 744 с.
 3. Черноскутов М. Ю., Ивлиев А. Д., Мешков В. В.// Теплофизика высоких температур, 2017, V. 55. No. 4. P. 634.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ СТЕНД ДЛЯ КОНТРОЛЯ ТЕРМОСТОЙКОСТИ КЕРАМИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ

Артамонов А.В., Мазилин И.В., Зайцев Н.Г.*

ООО ТСЗП, Щербинка, Россия

**art-bass@mail.ru*

Одной из важнейших теплофизических характеристик керамических покрытий, в частности, теплозащитных покрытий (ТЗП), сформированных на деталях, эксплуатируемых при высоких температурах, является их термостойкость. Температура поверхности деталей с ТЗП в процессе эксплуатации может циклически изменяться в широком интервале за достаточно короткий промежуток времени, что может привести к разрушению ТЗП вследствие возникновения высоких механических напряжений, обусловленных, как правило, различием в коэффициентах термического расширения материалов покрытия и ос-

новы [1]. По этой причине особый интерес представляет возможность контроля термостойкости ТЗП в условиях близких к эксплуатационным. В работе представлены результаты контроля термостойкости ТЗП, сформированных методом атмосферного плазменного напыления на подложках из жаропрочного сплава марки ВЖ-98 при одностороннем газовом нагреве пропан-кислородной горелкой в условиях, имитирующих условия работы деталей горячего тракта газотурбинного двигателя (циклический нагрев с последующим охлаждением в интервале температур от 50 до 1200 °С). Показаны различия в механизмах разрушения ТЗП, сформированных на основе стабилизированного материала ($ZrO_2-7.5Y_2O_3$) и стабилизированного материала ($ZrO_2-7.5Y_2O_3$), дополнительно модифицированного углеродными нанотрубками (0,1 масс. %) в процессе получения порошкового материала. Обсуждается влияние дополнительно введенного модификатора на термостойкость сформированного ТЗП.

1. Irene Spitsberg, Jim Steibel Thermal and environmental barrier coatings for SiC/SiC CMCs in aircraft engine applications. Int. J. Appl. Ceram. Technol., 1 [4] 291-301, 2004.

ИЗМЕРЕНИЯ ТЕПЛОВЫХ ПОТОКОВ В ДИАПАЗОНЕ ОТ 5 ДО 2500 КИЛОВАТТ НА КВАДРАТНЫЙ МЕТР

Осадчий С.М., Потапов Б.Г., Соколов Н.А.*

ВНИИФТРИ, Менделеево, Россия

**osm@vniiftri.ru*

Для экспериментальных исследований, технологических процессов и испытаний материалов имеет большое значение измерение плотности радиационных тепловых потоков высокой интенсивности [1-3].

Существенной проблемой для разработки эталонов, обеспечивающих единство измерений потоков высокой интенсивности, является создание источника мощного теплового потока в лабораторных условиях. Источник должен обеспечивать стабильность излучения во времени и однородность плотности теплового потока на площади, превышающей размер приёмной площадки калибруемых датчиков. В качестве источника тепловых потоков выбрана ксеноновая газоразрядная лампа высокого давления мощностью 7 кВт с эллиптическим отражателем диаметром 380 мм, фокусирующим тепловые лучи от дуги газоразрядной лампы и формирующим тепловой поток высокой интенсивности. Для получения однородного теплового потока в установке используется кварцевый световод, геометрия которого рассчитана таким образом, чтобы перераспределить плотность потока равномерно по сечению. Достигнутая неоднородность плотности теплового потока составила 2 % на площади 100 мм².

Для абсолютных измерений теплового потока на выходе световода устанавливаются измерительный радиометр-калориметр. Радиометр-калориметр измеряет плотность теплового потока методом замещения электрической мощностью. На основе такой установки в ФГУП «ВНИИФТРИ» разработан и аттестован «Государственный эталон единицы плотности радиационного теплового потока в диапазоне от 5 до 2500 кВт/м²» с метрологическими характеристиками: НСП не более 2.9 %, СКО не более 0.3 % [3].

1. Р.Ш. Еналеев, И.В. Красина, В.С. Гасилов, О.А. Тучкова, Л.И. Хайруллина. Измерение высокоинтенсивных тепловых потоков, ВЕСТНИК КТУ, т. 16, № 15, 2013, с. 298-302.
2. A.V. Murthy, B.K. Tsai, R.D. Saunders. Comparative Calibration of Heat Flux Sensors in Two Blackbody Facilities. Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology, V. 104, 1999, p. 487.

3. С.М. Осадчий, Б. Г. Потапов, Государственный эталон единицы плотности радиационного теплового потока в диапазоне от 5 до 2500 кВт/м², Альманах современной метрологии №12, 2017 г., с. 65-72.

ИНФРАКРАСНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕПЛООВОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ МИКРООБЪЕКТОВ.

Сенченко В.Н., Коновалов П.А., Ильичев М.В., Капустин Д.И.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**pyrolab@mail333.com*

Представлена оригинальная измерительная система и метод измерения температурных полей в интегральных микросхемах для контроля теплового сопротивления между кристаллом микросхемы и ее корпусом непосредственно в производственных условиях. Разработанная система реализована на инфракрасной микроболометрической матрице и позволяет осуществлять измерение температурных полей микросхем с высоким пространственным разрешением до 15 мкм. Инфракрасная система измеряет температуру в диапазоне 40–200 °С, а также позволяет определять небольшой прирост температуры микросхем около 1–2 °С при различных режимах работы. Инструментальная погрешность измерений температуры не превышает ±0,5 °С для модели черного тела. Для определения теплового сопротивления в систему включена специальная массивная медная тепловая нагрузка, обеспечивающая стабилизацию температуры корпуса ИС в диапазоне 40–170 °С, при долговременном дрейфе менее ±0,1 °С. Система состоит из оптико-электронного блока с микроболометрической матрицей, инфракрасного объектива с жидкостной стабилизацией температуры корпуса на уровне ±0,02 °С, массивной тепловой нагрузки с регулируемой температурой, прецизионного термостата потока жидкости с твердотельным охлаждающим элементом. Новизна подхода заключается в применении автоматической коррекции измеряемой температуры на эффективную излучательную способность объекта, что позволяет без специального черного покрытия с известной излучательной способностью контролировать тепловое сопротивление между микросхемой и ее корпусом в условиях производства.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (Грант № 18-08-00923).

ПОВЫШЕНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ ЧИСТОТЫ ЭЛЕКТРОКОРУНДА ПУТЕМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПРОКАЛИВАНИЯ В ВАКУУМЕ

Григоренко А.В., Беляев Г.Е., Власкин М.С., Липатова И.А., Жук А.З.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**belyaev_g@yahoo.com*

Целью данной работы было исследование возможности повышения химической чистоты промышленного белого электрокорунда путем высокотемпературного прокаливания в вакууме. Температура отжига составляла 2023 К (1750°С), давление в вакуумной камере было не хуже 3×10^{-3} Па (2×10^{-5} торр).

Исследованы три типа образцов промышленного белого электрокорунда. Образцы были извлечены из верхней части 6-ти тонного слитка – т.н. корка, а также из его средней и нижней частей. До и после отжига для каждого образца были проведены гранулометрические измерения методом лазерной дифракции. Средний размер гранул образцов до/после обработки [мкм]: корка слитка – 16/25, средняя часть слитка – 32/32, нижняя часть слитка – 64/65

Исследование химического состава образцов (60 элементов) было осуществлено методом ИСП МС. Суммарное содержание примесей после вакуумной термообработки снизилось приблизительно на порядок. После обработки образцы электрокорунда были практически полностью очищены от таких примесей как Na, Mg, K, Mn и Zn. Содержание железа в исследованных образцах снизилось в 8-10 раз.

Процесс очистки, вакуумного рафинирования корунда состоит из трех основных стадий: i) диффузии примеси в объеме частиц к поверхности; ii) испарения примеси с поверхности частицы; iii) диффузии примеси по порам частицы.

В работе продемонстрирована возможность повышения химической чистоты порошков промышленного белого электрокорунда путем вакуумной термообработки. Представленные результаты могут быть использованы для получения в промышленных масштабах абразивных и огнеупорных корундовых материалов повышенной чистоты.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКОПЛЁНОЧНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛЫХ МИКРОСФЕР

Пророкова М.В., Бухмиров В.В., Гаськов А.К., Сулейманов М.Г.*

ИГЭУ, Иваново, Россия

**prorokova_mv@list.ru*

Использование энергосберегающих красок для снижения потерь тепловой энергии при транспорте и потреблении тепловой энергии в настоящее время привлекает внимание исследователей и инженеров. Краски на основе полых микросфер, расположенных в связующем материале, обладают рядом достоинств по сравнению с традиционными видами тепловой изоляции: низкий коэффициент теплопроводности, малая поглощательная способность влаги, низкая коррозионная активность и достаточная механическая прочность. При этом тонкопленочные энергосберегающие покрытия обладают свойствами красок, что существенно упрощает нанесение теплоизоляционного состава на изолируемую поверхность.

Несмотря на перечисленные достоинства, теплофизические свойства энергосберегающих красок исследованы недостаточно полно. Представленные в научной и технической литературе данные о значениях теплофизических коэффициентов отличаются минимум на порядок. Поэтому исследование теплофизических свойств энергосберегающих тонкопленочных покрытий (энергосберегающих красок) актуальная задача, решение которой позволит повысить точность теплотехнических расчетов.

В работе приведены результаты экспериментального исследования теплофизических свойств энергосберегающих красок, в частности, дано описание экспериментального стенда для оценки коэффициента теплопроводности и стенда для оценки коэффициента температуропроводности красок на основе полых стеклянных микросфер марки МС-В2Л в связующем материале из стирол-акриловой дисперсии «Акрилан 101».

По результатам серии экспериментов среднее значение коэффициента теплопроводности в интервале температур 20–100 °С составило 0,019–0,028 Вт/мК в зависимости от концентрации наполнителя. Также получен диапазон значений для коэффициента температуропроводности.

Новые экспериментальные данные о теплофизических свойствах тонкопленочных покрытий (энергосберегающих красок) повышают точность теплотехнических расчетов при определении тепловых потерь в многослойных ограждающих конструкциях.

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННАЯ ДИАГНОСТИКА ДИНАМИКИ ДВИЖЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ МИШЕНИ ПРИ АБЛЯЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЧАСТОТНО-МОДУЛИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

Комаров П.С., Струлева Е.В.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**komarov-p@yandex.ru*

Разработана методика фемтосекундной спектральной интерферометрии с применением частотно-модулированных диагностических импульсов для непрерывной регистрации смещения поверхности пленочных металлических мишеней. Методика непрерывной регистрации основана на том, что различные спектральные компоненты диагностического импульса зондируют исследуемую область мишени в различные моменты времени. Методика позволяет получать изображения с высоким пространственным и временным разрешением образцов в пикосекундном временном диапазоне.

Для диагностики деформаций используется интерферометр Майкельсона с переносом изображения (конфигурация Линника) поверхности исследуемого образца на входную щель спектрометра. Разложение в спектр частотно-модулированного сигнала с выхода интерферометра проводилось с помощью дифракционного спектрометра. Запись оптических сигналов на выходе спектрометра осуществлялась ПЗС-камерой.

Реализованная схема измерений обеспечивает непрерывную регистрацию смещения поверхности образца как функцию времени с пространственным разрешением и различным временным разрешением, определяемым дисперсией спектрометра.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГСТЕКЛА НА УСТАНОВКЕ ТАУ-5

Свириденко В.И.

ВНИИФТРИ, Менделеево, Россия

visvirid@vniiftri.ru

Установка ТАУ-5 предназначена для измерения теплопроводности и температуропроводности твердых образцов (с погрешностью 2% и 5–8% соответственно) в диапазоне температур от 80 до 360 К абсолютным нестационарным методом нагретого круга [1–4]. Метод основан на нагреве известным тепловым потоком тонкого круглого датчика, помещенного между двумя образцами из исследуемого материала или между образцом из исследуемого материала и образцом из материала с известными свойствами. Регистрируя зависимость изменения температуры датчика от времени при его нагреве постоянным током, получают информацию о теплофизических свойствах материала. Автоматический режим измерения и последующая обработка записанных результатов обеспечиваются компьютерно-измерительной системой «АКСАМИТ-6,13» и программным обеспечением. Установка ТАУ-5 была аттестована, как Государственный рабочий эталон единицы теплопроводности 2-го разряда в диапазоне 0,02–15 Вт/(м·К). Оргстекло в симметричном варианте исследовалось на ТАУ-5, как наиболее часто встречаемый и надёжный материал мер 3-го разряда. Исследование показало наличие гистерезиса в результатах измерения теплопроводности оргстекла. Начиная от 200 К и выше оргстекло проявляет более высокую теплопроводность при нагреве образца, чем при его охлаждении. Расхождение доходит до 2%, что соизмеримо с погрешностью мер 3-го разряда 3%.

-
1. Карслоу Г., Эгер Д. Теплопроводность твёрдых тел., «Наука», 1964г. 487с.
 2. Beck J.V. International Journal Heat Mass Transfer, 1981. V.24, p. 155-164.

3. Свириденко В.И., Ушаков С.И. Способ определения теплофизических характеристик материалов. Авторское свидетельство №1602184, 22.06.1990г.
4. Свириденко В.И., Ушаков С.И. Исследование теплофизических характеристик кварцевого стекла КВ нестационарным методом. V Всесоюзная научно-техническая конференция «Метрологическое обеспечение теплофизических измерений при низких температурах», г. Хабаровск. Тезисы докладов, часть I, 1988, стр. 36-37.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ РАСТВОРОВ МЕТОДОМ РЕБИНДЕРА

*Сафаров М.М.,^{*1} Незматов А.,² Давлатов Р.Дж.,² Хакимов Д.Ш.,³
Раджабов А.Р.,³ Рафиев С.С.³*

¹ФМГУ им. М.В. Ломоносова, Душанбе, Таджикистан, ²ТГПУ им. С. Айни, Душанбе, Таджикистан, ³ЭИТ, Бохтар, Таджикистан

*mahmad1@list.ru

Как известно, молекулы внутри жидкости и на ее поверхности находится не в одинаковых условиях. Молекула внутри жидкости находится во взаимодействии с окружающими ее другими молекулами. Равнодействующая этих сил равна нулю. На свободной поверхности жидкости молекулы находятся под действием несимметричных сил, т.к. силы взаимодействия между поверхностной молекулой и внутренними молекулами жидкости сильнее, чем силы взаимодействия между этой же молекулой и молекулами паров жидкости, находящихся вне этой жидкости. В этом случае результирующая сила, действующая на молекулу, находящуюся на поверхности, отличается от нуля и направлена внутрь жидкости по нормали к ее поверхности. Эта результирующая сила является причиной возникновения силы поверхностного натяжения и создает дополнительное давление на жидкость. Под действием результирующей силы молекулы, находящиеся на поверхности жидкости притягиваются во внутрь жидкости. Вследствие этого, площадь поверхностного слоя стремится к уменьшению и сам слой натягивается как упругая пленка.

Для измерения коэффициента поверхностного натяжения растворов системы бензола-полистирола, бензола-растительных масел, диизопропилового эфира и бензола при различных температурах и атмосферном давлении использован вышеперечисленный метод. Общая относительная погрешность измерения коэффициента поверхностного натяжения при доверительной вероятности $\alpha = 0,95\%$ общая относительная погрешность измерения коэффициента поверхностного натяжения, включая (случайные, систематические, методические, инструментальные и др.) составляет 0,032%. Как установлено экспериментальными опытами, коэффициент поверхностного натяжения зависит от концентрации растворителей. Коэффициент поверхностного натяжения численно равен работе, необходимой для уменьшения площади поверхности жидкости на единицу.

1. Физический практикум./ Под редакцией В.И.Ивероновой/ М.: Наука, 1968.

ОСОБЕННОСТИ ОМИЧЕСКОГО НАГРЕВА СИЛИЦИРОВАННОГО КАРБИДА КРЕМНИЯ ПРИ ИЗМЕРЕНИИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР

Костановский А.В., Пронкин А.А., Зеодинов М.Г., Костановская М.Е.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**pronkin.a.a@gmail.com*

Силицированный карбид кремния SiC+Si является высокотемпературным материалом. Как правило, значения температуры, при которых используются нагреватели из силицированного карбида кремния на воздухе, не превышают ~1600 К.

Приведено описание установки, на которой реализованы и исследованы особенности омического нагрева силицированного карбида кремния при температурах выше 1600 К. Показано, что использование оригинальной программы ПК с двухпараметрической (сила тока и температура) обратной связью для регулирования напряжения, подводимого к образцу, и специального оборудования позволило реализовать устойчивый стационарный тепловой режим, необходимый для определения сопротивления. Измерено удельное электрическое сопротивление силицированного карбида кремния в диапазоне температур 1200–2200 К.

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ИСТИННОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ ПО ИЗЛУЧЕНИЮ В «СЕРОМ» ПРИБЛИЖЕНИИ

Русин С.П.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

sprusin@yandex.ru

Как известно, термометры (пирометры) излучения не требуют непосредственного контакта с объектом измерения и обладают высоким быстродействием. Поэтому они широко используются при теплофизических исследованиях. Однако, в этом случае, необходимо знать излучательную способность ϵ места визирования при заданной длине волны в направлении излучения. Причём, величина ϵ , как правило, неизвестна.

В данном сообщении рассматривается одновременное определение термодинамической (истинной) температуры и излучательной способности непрозрачного свободно излучающего объекта по зарегистрированному спектру теплового излучения в «сером» приближении. Полагается, что в заданном спектральном интервале $ln\epsilon = a_1 + a_2/\lambda$, где a_1, a_2 — постоянные коэффициенты. Показано, что объект измерения может излучать, как «серое» тело, даже в случае, когда его излучательная способность меняется по спектру в несколько раз. Представлено соотношение для оценки точности «серого» приближения. Для тугоплавких металлов сравниваются распределения спектральных интенсивностей в видимом спектре излучения. Обсуждается использование вольфрамовой спирали в качестве источника освещения. Обсуждаются подходы, основанные на более реалистичных моделях для излучательной способности.

ПРЕЦИЗИОННЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ЛЕГКОКИПЯЩИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ

Благонравов Л.А., Моденов А.А.*

МГУ, Москва, Россия

**blagonravovla@mail.ru*

В работе [1] приведены результаты исследования теплофизических свойств цезия в области аномального поведения этих свойств. Интерпретацию аномалий затрудняет малая величина эффектов. На участке форсированного роста адиабатического термического коэффициента давления (а.т.к.д.) величина эффекта составила 5% при случайной погрешности, равной 2%. В предлагаемой работе предпринята попытка увеличить точность измерений. Изучается также термодинамическая производная а.т.к.д.:

$$\chi = \left(\frac{1}{T}\right) \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_s = \frac{\alpha_p}{c_p \rho}, \quad (1)$$

где α_p — коэффициент теплового расширения, $c_p \rho$ — теплоемкость единицы объема. Для измерений используется установка, в которой изменение давления осуществляется в периодическом режиме. Программное обеспечение позволяет осуществлять одновременное осреднение значений амплитуды колебаний давления и амплитуды колебаний температурного отклика с последующим определением их отношения. В установке использован усовершенствованный модулятор давления, позволяющий создавать колебания давления формы, близкой к синусоидальной (величина второй гармоники составляет не более 10%). Ответные температурные колебания образца регистрировались прецизионным нановольтметром RS-810 с синхронным цифровым детектором. Для разделения постоянного и периодического температурных сигналов использовался суперконденсатор (ионистор) большой емкости, благодаря чему стало возможным регистрировать одномоментно амплитуду колебаний давления, амплитуду температурных колебаний образца и его текущую температуру. Используемая в настоящее время методика гарантирует определение а.т.к.д. со случайной погрешностью, оцениваемой в 0,5–1%, что обеспечивает возможность более полного изучения характера аномалий. Проведено несколько серий измерений а.т.к.д. цезия в интервале температур 320–620 К.

-
1. L.A.Blagonravov, S.N.Skovorod'ko, A.S.Krylov, L.A.Orlov et al. Phase Transition in Liquid Cesium near 590 K // J. Non-Cryst. Solids 277 (2000) 182-187.

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛООВОГО ФОНА НА ИЗМЕРЯЕМУЮ ИНТЕГРАЛЬНУЮ НАПРАВЛЕННУЮ МОЩНОСТЬ ИЗЛУЧЕНИЯ ОБРАЗЦА ИЗ СПЛАВА Pt–10%Rh

Менделеев В.Я., Качалов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**v_mendeleyev@ihed.ras.ru*

Экспериментальное измерение интегральной направленной мощности излучения материалов в контролируемых газовых средах предусматривает исключение или корректный учет основных составляющих теплового фона [1]. На специально созданной установке экспериментально определялся вклад составляющих теплового фона в измеряемую интегральную направленную мощность излучения образца из сплава Pt-10%Rh.

Установка включала электронагреватель с образцом, измеритель интегральной направленной мощности излучения образца, и медный водоохлаждаемый корпус, состоящий из

двух частей. Компоненты оптической схемы измерителя мощности: водоохлаждаемая диафрагма и термодатчик [2] теплового излучения, расположенные на одной оптической оси. Одна часть корпуса устанавливалась между нагревателем и охлаждаемой диафрагмой, а вторая часть корпуса — между охлаждаемой диафрагмой и приемником теплового излучения. На поверхности охлаждаемой диафрагмы, обращенной к образцу, устанавливался экран с поглотителем [3] теплового излучения. Эксперименты проводились в интервале температур от 72 °С до 640 °С.

Проведенное исследование показало, что основной вклад в тепловой фон, влияющий на измеряемую интегральную мощность излучения образца, вносит неэкранированное исследуемым образцом тепловое излучение нагревателя, отраженное внутренними стенками охлаждаемого корпуса. Нанесение поглотителя [3] теплового излучения на внутренние стенки корпуса позволило определить интегральную направленную мощность излучения образца из сплава Pt-10%Rh с относительной погрешностью не более 2,5% при температуре 640 °С.

1. R. B. Pérez-Sáez, L. del Campo, M. J. Tello // Int. J. Thermophys. 2008. V. 29. P. 1141.
2. Thermal Power Sensor Head, <https://www.thorlabs.com/thorproduct.cfm?partnumber=S302C>.
3. A. V. Grigorevskiy, L. V. Kiseleva, N. V. Strapolova // Astrophys. Space. Sci. Proc. 2013. V.32. P. 177.

ПРИМЕНЕНИЕ ПИРОМЕТРА С ЛОГАРИФМИЧЕСКИМ УСИЛИТЕЛЕМ В УСТАНОВКЕ ИМПУЛЬСНОГО НАГРЕВА ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ТОКОМ

*Дороватовский А.В.,^{*1,2} Шейндлин М.А.¹*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

**a.dorovatovskiy@gmail.com*

Для исследования термодинамических свойств металлов в широком диапазоне температур нашел применение метод изобарического расширения, более часто называемый методом электровзрыва проводников. Он заключается в нагреве проволочных образцов импульсом тока высокой плотности за время не превышающие, как правило, 100 мкс. В таком эксперименте обычно исследуется ряд термодинамических свойств электропроводного вещества: энтальпия (теплоемкость) и плотность измеряется в широком диапазоне температур. При этом, для регистрации зависимостей энтальпии и теплоёмкости от температуры требуется записать кривые тока и напряжения через образец для вычисления выделившегося джоулева тепла и, собственно, измерить, например, яркостную температуру в процессе эксперимента пирометром. Для измерения плотности применяется теневая съемка образца высокоскоростной камерой. Следует отметить, что при нагреве от 1500 К до 6500 К яркость теплового излучения на длине волны 900 нм меняется на 4 порядка, что требует применения специальных методик измерения температуры. Для решения проблемы регистрации сигнала в широком диапазоне применяются логарифмические усилители, однако их время отклика составляет, как правило, единицы миллисекунд. Для применения в задаче импульсного нагрева электрическим током был реализован пирометр с логарифмическим усилителем обеспечивающий быстроедействие на уровне микросекунд. Указанный пирометр был применен в эксперименте по измерению энтальпии и плотности жидкого циркония в диапазоне давлений до 3 килобар и до температур более 5000 К.

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СИЛОВОГО ПОЛЯ ClayFF ДЛЯ
АТОМИСТИЧЕСКОГО КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ПРИРОДНЫХ И СИНТЕЗИРОВАННЫХ НАНОПОРИСТЫХ
МАТЕРИАЛОВ И ИХ ГИДРАТИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

Калиничев А.Г.

¹*IL-SAMMA, Москва, Россия, ²SUBATECH, Нант, Франция*

kalinich@subatech.in2p3.fr

Детальное понимание на фундаментальном молекулярном уровне и способность предсказывать термодинамические, структурные и транспортные свойства "связанной" воды в глинах и других природных и синтетических нанопористых материалах чрезвычайно важны для многих геохимических и технологических приложений. Экспериментальные исследования таких систем на нанометровом масштабе не всегда возможны, а их результаты чаще всего не поддаются однозначной интерпретации и требуют построения каких-либо молекулярных моделей (часто — вполне умозрительных) для извлечения и количественной оценки вкладов поверхностей и нанопорового пространства в суммарные свойства материала на основе таких данных. Методы атомистического компьютерного моделирования служат здесь хорошим подспорьем и существенно дополняют данные измерений, даже если таковые имеются. Однако построению точных и реалистичных молекулярных моделей таких сложных материалов, как гидратированные глины, препятствует великое разнообразие их составов, и значительный вклад структурного и композиционного беспорядка. Силовое поле ClayFF [1] изначально было разработано для преодоления именно этих трудностей в компьютерном моделировании таких материалов и адсорбции различных неорганических и органических молекул на их поверхностях. В докладе будет дан краткий обзор основных возможностей, допущений и ограничений применения параметризации ClayFF для атомистического компьютерного моделирования упомянутых материалов с особым акцентом на новые результаты, позволяющие строить и количественно изучать более совершенные модели [2–4].

1. R.T. Cygan, J.-J. Liang, A.G. Kalinichev (2004) *J. Phys. Chem. B*, 108, 1255-1266.
2. M.Szczerba, A.G.Kalinichev (2016) *Clays Clay Min.*, 64, 488-502.
3. Androniuk, C. Landesman, P. Henocq, A.G. Kalinichev (2017) *Physics and Chemistry of the Earth A/B/C*, 99, 194-203.
4. M.Pouvreau, J.A.Greathouse, R.T.Cygan, A.G.Kalinichev (2017) *J. Phys. Chem. C.*, 121, 14757-14771.

ВЯЗКОСТЬ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРАВИЛА СМЕШЕНИЯ

Писарев В.В.

ОИВТ РАН, Москва, Россия

pisarevvv@gmail.com

В работе представлены результаты молекулярно-динамических расчетов вязкости жидких смесей в системе метан–н-бутан–н-пентан. Углеводородные флюиды моделировались потенциалом TraPPE-EH [1]. Вычисления проведены методом неравновесной молекулярной динамики [2].

Для чистых углеводородов и смесей показана применимость правила Бачинского $\eta = C/(v - b)$, где η — вязкость жидкости, v — молекулярный объем, C и b — константы, характеризующие жидкость. Для предсказания вязкости смесей произвольного состава проверены правила смешения, основанные на уравнении Бачинского, на правиле Арениуса и правиле кубического корня. В качестве базовых состояний, при которых рассчитываются вязкости чистых веществ для правил смешения, предлагается использовать состояния с тем же молярным объемом, что и у компонентов смеси. Для рассмотренных смесей наилучшее согласие прямого расчета вязкости смеси и расчета по правилам смешения получено для правила смешения на основе уравнения Бачинского.

Предлагаемые правила смешения могут использоваться для предсказания вязкости стабильных и метастабильных смесей жидкостей, а также жидкостей с растворенными в них газами.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №17-79-20391.

-
1. Chen B. and Siepmann J.I. // J. Phys. Chem. B, 1998. V. 103. P. 5370-5379.
 2. Müller-Plathe F. // Phys. Rev. E. 1998. V. 415. No. 3. P. 604.

ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ФОНОНОВ НА ПЕРЕНОС ТЕПЛА

Хвесьюк В.И., Баринов А.А., Цяо В.*

МГТУ, Москва, Россия

**khvesyuk@bmstu.ru*

Процессы переноса тепла в твёрдых телах определяются кинетикой газа квазичастиц — фононов. В этом заключается аналогия с кинетикой классических газов. Однако, характер взаимодействий фононов значительно сложнее взаимодействий атомов и молекул. Прежде всего, это большое число факторов, влияющих на кинетику фононов [1, 2]. 1) Тройные взаимодействия фононов, сопровождающиеся их слиянием или распадом. 2) Наличие различных типов фононов. 3) Различные типы взаимодействия фононов. 4) Различные зависимости длин пробега фононов от энергии для разных типов фононов. 5) Отдельно — взаимодействия фононов с несовершенствами решётки твёрдого тела. Представляет интерес оценка относительных вкладов этих факторов в интенсивность и характер переноса тепла в зависимости от температуры твёрдого тела.

Анализ перечисленных факторов ведётся на основе специально разработанного кода, использующего метод Монте Карло.

Полученные результаты необходимы как для получения дополнительной информации о сложных процессах переноса тепла в твёрдых телах, так и для развития средств решения соответствующих задач методом Монте Карло.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и образования Российской Федерации, проект 16.8107.2017 / 6.7.

1. Пайерлс Р. Квантовая теория твёрдых тел. М.: ИЛ, 1956.
2. Klemens P.G. // Solid State Phys.–Adv. Res. Appl., 1958. Vol. 7:1-98.

ЧИСЛЕННОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ, СОЗДАВАЕМОГО СИЛЬНЫМ НЕОДНОРОДНЫМ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЕМ

*Апфельбаум М.С., Гаджиев М.Х., Долуденко А.Н.**

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**adoludenko@gmail.com*

Аналитически получена квазиэкспоненциальная формула для вольт-амперных характеристик низкопроводящих диэлектрических жидкостей в присутствии высоковольтного электрического поля путем решения системы уравнений [1]. Данные уравнения предназначены для описания образования предпробойного заряда в квазинейтральных средах, таких как трансформаторное масло. Сильное электрическое поле создается системой электродов “провод над плоскостью”.

В работе изучается движение струй слабопроводящей жидкости, формирующихся под воздействием приложенного электрического поля электродов. Для численного анализа характеристик движения жидкости используется метод Мак-Кормака, локальное измельчение расчетной сетки, а также учитывается влияние поля самого объемного заряда жидкости. Помимо этого представлены результаты экспериментальных исследований движения жидкости в данной постановке задачи. Приведены характерные скорости движения потоков жидкости в межэлектродной области. Получены изображения вихревых структур и потоков жидкости. Результаты представлены для нескольких значений приложенного постоянного напряжения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект №18-0800136).

1. Apfelbaum M.S. and Apfelbaum E.M. // Plasma Phys. Rep. 1998 V. 24 P. 850–856.

ГИБРИДНЫЕ РАСЧЕТЫ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ

*Очков В.Ф.,^{*1,2} Орлов К.А.,^{1,2} Герк С.И.¹*

¹НИУ "МЭИ Москва, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия

**ochkov@twi.mpei.ac.ru*

В докладе обсуждается метод гибридных расчетов термодинамических циклов с опорой на компьютерные программы по свойствам рабочих тел и теплоносителей. Показано, как можно совмещать численные и символьные инструменты современных компьютерных математических программ для решения задач термодинамики, в частности, для расчетов термодинамических циклов, включая и бинарные.

МОДЕЛЬ ДЛЯ ОЦЕНКИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ

Шульц О.В.

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, Россия

o.v.shults@vniitf.ru

В настоящее время существует большое количество баз данных и справочников по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ, однако остается также и большое количество химических соединений, термодинамические свойства которых не описаны или описаны недостаточно.

Решение проблемы недостающих данных по свойствам соединений может быть получено посредством обобщения уже имеющихся данных и построения на их основе моделей количественных соотношений структура–свойство. В настоящей работе предлагается такая модель, использующая подход фрагментарных дескрипторов и обобщающая данные по теплоёмкостям, энтальпиям образования и энтропиям соединений. Модель позволяет получать оценки значений термодинамических функций для произвольных соединений, составленных из фрагментов, полученных при анализе базы данных термодинамических свойств индивидуальных веществ.

Расчёты, выполненные по модели, показали хорошее согласие расчётных значений со справочными. Относительная ошибка при оценке энтальпии находится на уровне 5%, при оценке энтропии на уровне 2%, а изобарной теплоёмкости на уровне 1%.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-01-00873.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ВЭС С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛЕЙ НА РЕШЕТКЕ

Мешков Е.А., Новоселов И.И., Янилкин А.В.*

ВНИИА, Москва, Россия

**novoselov@vniia.ru*

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) являются новым классом перспективных металлических материалов, они содержат 4 и более основных компонентов в примерно равных концентрациях. На сегодняшний день уже получены ВЭС, превосходящие традиционные сплавы по различным характеристикам: жаропрочности, устойчивости к коррозии, радиационной стойкости.

Однако атомно-масштабное моделирование ВЭС затруднено из-за сложного химического состава этих материалов. Так, квантовая молекулярная динамика (МД) не позволяет достичь необходимых пространственно-временных масштабов, а классическая МД не в состоянии обеспечить достаточную точность расчетов. Таким образом, необходимо разработать новый подход, который позволил бы точно и вычислительно эффективно описывать ВЭС на атомном масштабе.

В данной работе исследуется эволюция структуры ВЭС с помощью методов кинетического Монте-Карло. Для расчета энергии системы используется модель на решетке [1], позволяющая воспроизводить результаты квантово-механических расчетов с ошибкой менее 5 мэВ/атом. Использование данного подхода позволило выявить упорядочение FeCoNiCr, заключающееся в образовании супер-решеток Fe и Cr.

Исследование проведено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00736.

1. Shapeev, A. // Computational Materials Science 2017. V. 139. p. 26

КОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ФИЛЬТРАЦИИ ФЛЮИДА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Захаров С.А.,^{*1,2} Писарев В.В.,¹ Чуданов В.В.¹

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

*stepanzh@gmail.com

Работа посвящена программной реализации модели, изложенной в [1]. Данная модель включает два уравнения баланса масс: для газовой (1) и жидкой фаз (2). Скорость фильтрации приближается линейным законом Дарси с использованием функций относительной фазовой проницаемости $f_i(s)$, давления в фазах считаются равными:

$$\begin{aligned}\frac{\partial m\rho_1 s}{\partial t} &= -\frac{\partial \rho_1 u_1}{\partial x} + F_1, \\ \frac{\partial m\rho_2(1-s)}{\partial t} &= -\frac{\partial \rho_2 u_2}{\partial x} + F_2, \\ u_i &= -\frac{k f_i(s)}{\eta_i} \frac{\partial P}{\partial x}, i = 1, 2.\end{aligned}$$

Система гидродинамических уравнений дополняется уравнениями состояния:

$$\rho_i = \frac{\mu_i(P, T)}{z_i(P, T)} \frac{P}{RT}, i = 1, 2.$$

Для подсчета сверхсжимаемостей z_i используется кубическое уравнение состояния, предложенное Брусиловским в [2].

В работе приводятся несколько подходов к решению гидродинамической системы уравнений и варианты их численных аналогов. Проводится валидация численных моделей, анализируется устойчивость и точность. Основной целью является моделирование течений с ретроградной конденсацией, возникающих при эксплуатации газоконденсатных скважин.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 17-79-20391).

-
1. Зайченко В.М., Майков И.Л., Торчинский В.М., Шпильрайн Э.Э. Моделирование процессов фильтрации углеводородов в газоконденсатном пласте. ТВТ, 2009, том 47, выпуск 5, 701–706.
 2. Баталин О.Ю., Брусиловский А.И., Захаров М.Ю. Фазовые равновесия в системах природных углеводородов. М.:Недра, 1992.

РАСЧЕТНАЯ ОЦЕНКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ВСПУЧЕННОГО ВЕРМИКУЛИТА

*Скурихин А.В.,*¹ Костановский А.В.^{1,2}*

¹МЭИ, Москва, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия

*SkurikhinAV@mpei.ru

Эффективным методом снижения объемного веса и теплопроводности теплоизоляционных материалов (ТИМ) может быть применение натуральных пористых наполнителей, таких как вспученный вермикулит, который получают обжигом вермикулитового концентрата. Данный материал обладает рядом уникальных свойств: малым объемным весом, низким коэффициентом теплопроводности, относительно высокой температурой плавления, химически инертен, долговечен, экологически безопасен [1, 2]. Такие свойства обеспечивают перспективность его применения в качестве добавки при изготовлении ТИМ и других материалов, используемых в строительстве, сельском хозяйстве, химической промышленности и энергетике. В последнее время одним из динамично развивающихся направлений для прогноза характеристик вновь разрабатываемых композиционных материалов при известных параметрах, таких как структура, свойства матрицы, наполнителей и др., остается компьютерное моделирование.

В настоящей работе предложена модель описания структуры вспученного вермикулита, представлены результаты решения задачи определения плотности теплового потока, поля и градиента температур внутри его зерна, исходя из подходов [3, 4], а также расчета коэффициента теплопроводности и его сравнение на основе данных из литературных источников.

1. Кальянов Н.Н. и др. Вермикулит и перлит - пористые заполнители для теплоизоляционных изделий и бетонов. - Под ред. В.А. Китайцева – Гос. Изд-во лит. по стр-ву, арх-ре и строит. Мат., М.: 1961 - 150 с.
2. К.Н. Дубенецкий, А.П. Пожнин Вермикулит. Стройиздат, Ленинградское отделение, 1971 - 176 с.
3. Kellet B.S. «The steady flow of heat through hot glass», Journal of the Optical Society of America, Volume 42, Number 5, May 1952.
4. Сергеев О.А., Мень А.А. Теплофизические свойства полупрозрачных материалов. М., Издательство стандартов, 1977, 288 с.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ПОДХОДЫ К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ СЖИМАЕМОСТИ И ФЛУКТУАЦИОННОГО ПАРАМЕТРА ЖИДКОСТЕЙ

Недялков Ю.В., Постников Е.Б.*

Курский гос. у-т, Курск, Россия

*ynedyalkov@gmail.com

Тейтоподобное уравнение состояния, базирующееся на флуктуационной теории (FT-EoS) $\rho = \rho_0 + k^{-1} \log [k\rho_0\kappa_T^0(P - P_0) + 1]$, предложенное в работе [1], которое является средством для высокоточного предсказания плотности при высоких давлениях в различных жидких средах, от органических до ионных жидкостей [2], требует знания не только плотности ρ_0 при нормальном давлении или давлении на кривой равновесия P_0 , но также и изотермической сжимаемости и ее производной, входящей в параметр k при соответствующих условиях.

Мы рассматриваем практические программные реализации их расчета для электронных таблиц, основанную как на референтных экспериментальных данных, таких как плотность, изобарная теплоемкость, скорость звука, так и на чисто предсказательных методах, использующих данные о молекулярной структуре и параметрах и подход групповых вкладов. Последний набор методов позволяет также находить скорость звука с жидких углеводородах, основываясь на свойствах, представленных в справочных базах данных, таких как DIPPR 801 (AIChE) [3], что обсуждается в контексте молекулярной упаковки и флуктуаций плотности. В дополнение будет представлен общий алгоритм синтаксического разбора химического идентификатора SMILES с целью использования в различных методах группового вклада для расчета термодинамических величин, снабженный реализующим его набором программных процедур, не требующих от конечного пользователя программирования при их применении.

Работа поддержана грантом РФФИ No. 16-08-01203.

1. Postnikov E.B., Goncharov, A.L., Melent'ev, V.V. // Intern. J. Thermophys. 2014. V. 35. P. 2115.
2. Chorążewski M., Postnikov E.B., Jasiok B., Nedyalkov Yu.V., Jacquemin J. // Scientific Reports. 2017. V. 7: 5563.
3. Postnikov E., Nedyalkov Y, Polishuk, I. // Mendeley Data. 2018 <http://dx.doi.org/10.17632/zshnj5c7v7.1>.

ТЕЧЕНИЕ КОЛМОГОРОВА И ЕГО ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ПЛОСКОМ КАНАЛЕ

Фортова С.В.

ИАП РАН, Москва, Россия

sfortova@mail.ru

Течение Колмогорова – двумерное движение вязкой жидкости, возникающие под действием по одной из координат периодического поля внешней силы [1-3]. Такая задача была поставлена Колмогоровым как модельная для исследования развития неустойчивости и перехода к турбулентности. Изначально, задача о течении жидкости под действием периодической силы рассматривалась лишь как удобный объект для аналитических исследований, однако, позже такое течение было реализовано в лабораторных условиях, за счёт магнетогидродинамического привода, позволившего создать в электролите периодическую силу, действующую на жидкость. Характерной особенностью течения является появление, при определённых условиях, автоколебательного режима («паркета») с системой вихрей, имеющей определённую структуру.

В данной работе выполнено прямое численное моделирование двумерного течения в слое слабо сжимаемой невязкой проводящей среды под действием периодической силы. Расчёты на основе уравнений Эйлера, показали, что при определённых условиях в проводящей жидкости могут возникать периодические структуры вихрей, похожие на режим «паркета» в течении Колмогорова. Исследовалось влияние различных параметров на характер течения.

1. Е.Б. Гледзер, Ф.В. Должанский, А. М. Обухов. Системы гидродинамического типа и их применение. М.:Наука, 1981.
2. А. М. Обухов. Течение Колмогорова и его лабораторное моделирование. УМН, 38(4):101–111, 1983.
3. О. М. Белоцерковский, С. В. Фортова. Макропараметры пространственных течений в свободной сдвиговой турбулентности, Журнал Вычислительной Математики и Математической Физики, 50(6), 1126–1139, 2010

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ВАКУУМНОЙ ОЧИСТКИ ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

*Власкин М.С., Жук А.З., Иванов П.П.**

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**peter-p-ivanov@yandex.ru*

На основе представления о пористой грануле как об ансамбле сплошных микрочастиц предложена модель процесса высокотемпературной вакуумной очистки микропористого оксида алюминия от примеси железа [1]. Модель описывает три этапа выхода примеси в вакуум: диффузия в монокристаллической микрочастице, испарение с ее поверхности и фильтрация примеси в газовой фазе по порам. Диффузионный фактор ограничения скорости процесса на три порядка превышает испарительный, что позволяет вместо точных решений сферически-симметричной диффузионной задачи для микрочастицы использовать аналитические решения, которые с помощью идентифицируемых параметров могут с достаточной точностью описать полученные экспериментальные данные. Уравнение снижения плотности примеси ρ_{AV} на среднем радиусе микрочастицы получено в виде:

$$\frac{d\ln(\rho_{AV})}{dt} = -\frac{1}{\chi} \quad \chi = \frac{R}{4} \left(\frac{\rho^*}{J^*} + \frac{R}{4D} \right) \quad J^* = \frac{p_{Fe}}{v_T} \quad v_T = \sqrt{\frac{2\pi kT}{m}}$$

Здесь χ — характерное время очистки, когда плотность примеси снижается в $\exp(1)$ раз, R — радиус микрочастицы, D — коэффициент диффузии атомов железа в оксиде алюминия, ρ^* — однородная начальная плотность примеси, J^* — поток испарения в вакуум согласно уравнению Герца–Кнудсена [2], v_T — тепловая скорость атомов железа в парообразном состоянии, p_{Fe} — давление насыщенного пара железа с учетом его относительной плотности в частице, m — масса атома железа. Фильтрация примеси в газовой фазе из пористой гранулы, сложенной из плотных сферических микрочастиц, описывается в рамках модели кнудсеновской диффузии.

Работа поддержана грантом РФФ (проект №14-50-00124).

1. Zhuk A.Z., Vlaskin M.S., Grigorenko A.V., Kislenco S.A., Shkolnikov E.I. Synthesis of high-purity α -Al₂O₃ from boehmite by high temperature vacuum treatment // Journal of Ceramic Processing Research. 2016. V. 17. № 9. P. 910-918.
2. Jafar Safarian and Thorvald A. Engh. Vacuum evaporation of pure metals // Metallurgical and materials transactions. 2013. V. 44a. P. 747.

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА TURBULENCE PROBLEM SOLVER (TPS) ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С МЕТАЛЛАМИ

*Шепелев В.В.,*¹ Фортова С.В.,¹ Иногамов Н.А.²*

¹ИАП РАН, Москва, Россия, ²ИТФ РАН, Москва, Россия

**vadim.aries@gmail.com*

Стремительное развитие современных вычислительных технологий позволяет существенно увеличить скорость моделирования требуемого процесса в микроэлектронике, биомедицине, наноплазмонике и многих других областях фундаментального и прикладного характера, что позволяет предсказывать различные сценарии развития рассматриваемого явления в зависимости от исходных данных, а так же оптимизировать разработки новых конструкций. Разработанный в ИАП РАН программный пакет Turbulence Problem

Solver (TPS) предназначен для численного решения гиперболических систем дифференциальных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью. Пакет представляет собой современный и расширяемый программный продукт. Архитектура пакета дает исследователю возможность моделировать различные физические процессы единообразно, с помощью различных численных методик и программных блоков, содержащих специфические для каждой задачи начальные, граничные условия и источники компоненты. Возможности пакета TPS продемонстрированы на примере задачи о взаимодействии фемтосекундных лазерных импульсов с тонкими металлическими пленками.

Представлено численное моделирование актуальной физической задачи о качественном исследовании механизма образования отверстий при фемтосекундной лазерной абляции золотой пленки, напыленной на толстую стеклянную подложку. В результате теоретической и экспериментальной работы сформулирована гипотеза о механизме образования отверстий при абляции. Представленная в работе газодинамическая модель явления опирается на представление пленки, подложки и вакуума в виде идеальной трехслойной среды. В двумерной постановке представлена упрощенная однотемпературная гидродинамическая модель, основанная на двухтемпературной модели Анисимова, Капелиовича и Перельмана [1] и нелинейных уравнениях динамики идеальной жидкости Эйлера.

1. С.И. Анисимов, Б.Л. Капелиович, Т.Л. Перельман, Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов, ЖЭТФ, 66 (2), 776-779 (1974).
2. С. В. Фортова, Л. М. Крагинский, А. В. Чикиткин, Е. И. Опарина, Программный пакет для решения гиперболических систем уравнений, Мат. моделирование, т. 25, № 5, стр. 123-135 (2013).

О РАЗВИТИИ СРЕДСТВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СИСТЕМ

Белов Г.В., Аристова Н.М.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**gbelov@yandex.ru*

Расчеты параметров равновесного состояния многокомпонентных гетерогенных систем получили широкое распространение в практике исследования высокотемпературных процессов с химическими превращениями. Вероятно, первый универсальный метод расчета равновесия был представлен в 1951 году в работе сотрудников NASA «General Method and Thermodynamic Tables for Computation of Equilibrium Composition and Temperature of Chemical Reactions». В СССР также были разработан метод расчета равновесного состава и свойств продуктов сгорания ракетных топлив, создана программа для ЭВМ и база данных по термодинамическим свойствам веществ, с использованием которых в 1971 году был создан справочник «Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания». Позже в МВТУ им. Н.Э. Баумана были предложены метод и универсальный алгоритм термодинамического расчета многокомпонентных гетерогенных систем. Создана программа АСТРА, которая получила широкое распространение и была использована для решения широкого класса задач, в частности, металлургических и плазмохимических. На основе алгоритма программы АСТРА разработана программа расчета равновесного состава и свойств сложных термодинамических систем с использованием модели неидеального газа REAL. Однако в реальных процессах далеко не всегда достигается термодинамическое равновесие. Например, при расширении продуктов сгорания в сопле ракетного двигателя происходит их охлаждение, вследствие чего происходит уменьшение скоростей

химических реакций, состав частично «замораживается». Для анализа этих и подобных им процессов необходимо использовать методы, сочетающие возможности термодинамики и кинетики. Такой подход нашел применение, в частности, при создании программных комплексов CHEMKIN и Chemical Workbench.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМЫ РАДИОАКТИВНЫЙ ГРАФИТ-CO₂

*Барбин Н.М.,^{*1,2,3,4} Сидаш И.А.,¹ Терентьев Д.И.,¹ Алексеев С.Г.^{1,4}*

¹ УрИ ГПС МЧС России, Екатеринбург, Россия, ² УрФУ, Екатеринбург, Россия, ³ УрГАУ, Екатеринбург, Россия, ⁴ НИЦ УРО РАН НцРБСМ, Екатеринбург, Россия

**NMBarbin@mail.ru*

Теплофизические свойства равновесной системы радиоактивный графит–углекислый газ рассчитаны при помощи программного комплекса TERRA [1]. Основной вклад в теплофизические свойства системы вносит конденсированный углерод до температуры его сгорания (973 К). При температуре больше 973 К теплофизические свойства системы определяются парогазовой фазой. На основании полученных данных выделены 4 основных температурных интервала в которых происходят изменения теплофизических свойств системы. Изменение теплофизических свойств системы в интервале температур от 373 до 673 К предположительно связаны с началом протекания реакции $U_3O_{5(cond.)} + 4CO_2 = 3UO_3^- + 4CO^+ + CO$. Изменение теплофизических свойств системы в интервале температур от 673 до 973 К связаны с протеканием реакции $U_3O_{5(cond.)} + 4CO_2 = 3UO_3^- + 4CO^+ + CO$ и исчезновением конденсированного C . Изменение теплофизических свойств системы в интервале температур от 973 до 2573 К носят линейный характер и определяются парогазовой фазой. Изменение теплофизических свойств системы в интервале температур от 2573 до 3273 К связаны с протеканием реакции $U_3O_{5(cond.)} + 4CO_2 = 3UO_3^- + 4CO^+ + CO$.

-
1. Барбин Н.М., Сидаш И.А., Терентьев Д.И., Алексеев С.Г. Компьютерное моделирование термических процессов с участием радионуклидов кальция, стронция и цезия при нагреве радиоактивного графита в атмосфере углекислого газа. Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика, 2017. No. 1. P. 73-82.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ РАСЧЁТАХ МАТЕРИАЛЬНОГО БАЛАНСА ТЕХНОЛОГИИ ЗЯТЦ

Паукова А.Е., Шульц О.В., Пешкичев И.В., Пугачев В.Ю.*

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, Россия

**paukovaae@mail.ru*

В рамках проектного направления «Прорыв» [1] ведутся работы по математическому моделированию технологий переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) и фабрикации топлива, создан программный комплекс (ПК) ВИЗАРТ [2], предназначенный для обоснования реализуемости и оптимизации параметров технологических линий замыкающей стадии ядерного топливного цикла (ЗЯТЦ).

При моделировании технологических процессов ЗЯТЦ возникают неопределенности, связанные как с составом ОЯТ перспективных реакторных установок, так и с вновь разрабатываемыми технологическими процессами. Полномасштабная экспериментальная отработка затрудняется как отсутствием в настоящее время образцов ОЯТ, так и сложностью

работы с реальными высокоактивными составами. Одним из способов оценки характеристик технологического процесса в этих условиях является термодинамическое моделирование.

Для этой цели в РФЯЦ-ВНИИТФ разрабатывается ПК TeDu [3], позволяющий рассчитывать химически равновесные составы систем различной сложности. При расчётах используется база данных, содержащая информацию о свойствах веществ, характерных для технологий ядерного топливного цикла (ЯТЦ). ПК TeDu может работать как в автономном режиме — в виде приложения с пользовательским интерфейсом, так и использоваться при проведении балансовых расчетов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-01-00873.

1. Адамов Е.О., Алексахин Р.М., Большов Л.А. и др. Проект «ПРОРЫВ» – технологический фундамент для крупномасштабной ядерной энергетики // Известия РАН. Энергетика. 2015. №. 1. С. 5–12.
2. Шмидт О.В., Макеева И.Р., Ливенцов С.Н. Моделирование технологических переделов ЗЯТЦ, как инструмент при создании и оптимизации технологических производств. // Радиохимия. 2016. Т. 58. №. 4. С. 316–323.
3. Пешкичев И.В., Куропатенко В.Ф., Макеева И.Р. [и др.]. Программный комплекс TeDu для решения задач термодинамического моделирования. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование» (Вестник ЮУрГУ ММП). 2018. Т. 11. №. 1. С. 84–94.

РАЗРАБОТКА БАЗЫ ДАННЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ВОЗДУХА В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР И ДАВЛЕНИЙ ДЛЯ ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСОВ РАСЧЕТОВ ГИПЕРЗВУКОВЫХ ТЕЧЕНИЙ

Рождественский А.В.

АО "ГРЦ Макеева Миасс, Россия

src@makeyev.ru

Возрастающие требования к точности и качеству аэродинамических расчетов ведут к увеличению количества ячеек расчетной сетки, что, несмотря на непрерывно растущую производительность процессоров, вынуждает исследователей искать способы снижения количества арифметических операций, приходящихся на элемент сетки. Применительно к проблеме моделирования термодинамических свойств воздуха вышеизложенные аргументы наводят на мысль об использовании аппроксимации таблично заданных термодинамических и теплофизических данных бикубическими сплайнами $S(p, t) = \sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 a_{k,l} p^k t^l$. При этом, общий объем коэффициентов бикубического сплайна, аппроксимирующего заданную таблицу, равен размеру таблицы, умноженному на 16, что, в принципе, позволяет держать в оперативной памяти процессора коэффициенты сплайнов, построенных по таблицам большого объема. Вышеизложенный подход применен в работе к моделированию следующих термодинамических и теплофизических величин воздуха как функций от давления и температуры: плотности, энтальпии, энтропии, удельной теплоемкости при постоянном давлении, скорости звука, динамической вязкости и теплопроводности. В качестве исходного материала для моделирования этих величин при температурах от 200 до 12000 градусов Кельвина и давлений от 0,001 до 300 атмосфер были выбраны таблицы из книг [1] и [2].

На основе полученной реализации термодинамических и теплофизических величин на

языке программирования “С” была создана “определенная пользователем модель реального газа” для программы ANSYS FLUENT 18,2, для которой затем была проведена валидация на задачах обтекания затупленных тел гиперзвуковым потоком воздуха с учетом доступных экспериментальных данных.

1. Предводителей А.С. и др. Таблицы термодинамических функций воздуха. М.: Изд-во АН СССР, 1957, 1962.
2. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: “Наука” 1972.

СИНЕРГЕТИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗРУШЕНИЯ ДВУХФАЗНЫХ КОНТАКТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

*Куанышев В.Т.,*¹ Сачков И.Н.,² Сорогин И.Г.,³ Сорогина Т.И.²*

¹УрТИСИ СибГУТИ, Екатеринбург, Россия, ²УрФУ, Екатеринбург, Россия, ³УрГУПС, Екатеринбург, Россия

**kuan06@mail.ru*

Одним из малоизученных факторов деградации электрических контактов является пространственная неоднородность выделяемого Джоулева тепла. В работе [1] рассматривается механизм возникновения своеобразной «тепловой структуры», когда содержащиеся в металле топологические дефекты строения и примеси становятся центрами интенсивного тепловыделения. В настоящей работе исследуется возможность возникновения синергетического механизма возникновения и роста термических трещин в двухфазных контактных и резистивных материалах. Для расчета пространственного распределения Джоулева тепла $q(x, y)$ рассматривалась система, содержащая слабо проводящие круглые включения и прямоугольные непроводящие трещины [2].

Анализ $q(x, y)$ и значения эффективной проводимости σ_{ef} при варьируемых значениях длины трещины, проводимости σ_i и концентрации C_i включений позволили заключить, что в определенной точке на поверхности включения в рассматриваемых условиях формируется пик тепловыделения, более чем в 5 раз превышающий среднее значение по образцу, что приводит к концентрации термических напряжений.

1. Икрянников В.И. // Инж.-Физич. Журн. 1992. Т. 62. N. 4. С. 617–623.
2. Kuanishev V.T., Sachkov I. N., Sorogin I. G., Sorogina T. I. // Journal of Physics: Conf. Series. 2017. V. 891.

ТРЕХМЕРНОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ НЕУСТОЙЧИВОСТИ КОНТАКТНОЙ ГРАНИЦЫ СТАЛКИВАЮЩИХСЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИН В ГАЗОДИНАМИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

*Фортова С.В., Уткин П.С.**

ИАП РАН, Москва, Россия

**pavel_utk@mail.ru*

В работе представлены результаты численного моделирования развития начальной стадии неустойчивости контактной границы соударяющихся металлических пластин. Математическая модель основывается на системе уравнений Эйлера для среды, подчиняющейся двучленному уравнению состояния. Параметры уравнения состояния откалиброваны

по расчетно-экспериментальным данным, основанным на реальных широкодиапазонных уравнения состояния металлов. Вычислительный алгоритм основан на схема Harten-Lax-van Leer. Начальное синусоидальное возмущение контактной границы между пластинами после прохождения волн разрежения от свободных границ пластин приобретает кратерообразную форму, что качественно соответствует натурным опытам.

ТЕПЛООБМЕН В СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ВОДЕ

Рютин С.Б., Скрипов П.В.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**ryutin.sergey@gmail.com*

Первые же опыты в ближней сверхкритической области параметров, проведенные в нестационарных условиях теплообмена на различных жидкостях, включая воду, выявили бросающийся в глаза парадокс. Если в стационарных условиях на результаты опытов существенно влияет пик изобарной теплоемкости, то в нестационарном опыте влияние этого пика полностью отсутствует. Более того, обнаружен эффект порогового снижения интенсивности теплопереноса, который выражен тем сильнее, чем ближе значение давления к критическому значению.

Обнаруженный эффект несомненно имеет фундаментальное значение, поскольку интерпретация физической картины, выражающейся в виде пика изобарной теплоемкости, вновь становится открытой.

Просматривается также практическое приложение эффекта. Появились веские основания полагать, что выбор рабочего давления вблизи критического, обычно это 25 МПа, не является оптимальным. Кроме того, по результатам наших опытов сформулирована дорожная карта дальнейших шагов, позволяющих приблизить создание ядерных реакторов, охлаждаемых сверхкритической водой.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-08-00381-а и комплексной программы Президиума УрО РАН, проект 18-2-2-3.

**ОБРАБОТКА РАЗНОРОДНЫХ ДАННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И
ПОСТРОЕНИЕ РЕКОМЕНДУЕМЫХ СООТНОШЕНИЙ**

*Чусов И.А.,*¹ Диденко В.И.,¹ Обысов Н.А.,² Новиков Г.Е.,² Проняев В.Г.³*

¹ИАТЭ НИЯУ МИФИ, Обнинск, Россия, ²ГК Росатом, Москва, Россия, ³Частное учреждение «Атомстандарт», Москва, Россия

**igrch@mail.ru*

В докладе приводится описание разработанной методики оценки разнородных термодинамических и теплофизических экспериментальных данных, и ее программной реализации в виде законченного программного средства.

Под словосочетанием «разнородные данные» авторы понимают наборы экспериментальных точек, полученных в различные годы (в настоящее время временной диапазон принятых к рассмотрению работ колеблется в интервале 1919 – 2014 гг.) разными авторами или коллективами авторов, различными методами, с различной степенью чистоты исходного материала и т.д. Последнее обстоятельство стало особенно актуальным в последние два десятилетия в связи со значительным улучшением качества измерений за счет применения весьма прецизионных методов измерений.

Основная особенность теплофизических и термодинамических данных, ориентированных на атомную энергетику – относительно небольшие наборы опытных значений полученных различными авторами. Обычно их число не превышает восьми – десяти точек. И только в последнее время начали появляться работы, в которых число экспериментальных

точек более десяти и даже более пятнадцати. Причина «скудности» опытного материала – чрезвычайная сложность и дороговизна проведения эксперимента в широком диапазоне режимных параметров.

В докладе приводится описание разработанной методики оценки экспериментальных данных с учетом специфики атомной энергетики и ее программная реализация.

Приводится описание разработанной базы данных, материалов ее составляющих и ее web-реализация.

**АНАЛИЗ РАЗРУШАЮЩЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ АЗОТНОЙ
ПЛАЗМЕННОЙ СТРУИ НА ТЕРМОСТОЙКИЕ МАТЕРИАЛЫ**

Хромов М.А., Чиннов В.Ф., Саргсян М.А., Кавыршин Д.И., Щербаков В.М.,
Ефимов А.В.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**volteg@mail.ru*

Процессы тепло- и массообмена в зоне взаимодействия высокотемпературного дозвукового плазменного потока с поверхностью сублимирующего термостойкого материала определяют скорость его разрушения [1–4]. Проводятся интенсивные работы по созданию и исследованию новых теплозащитных материалов на основе композитов (SiC/C, HfB₂-SiC и др.), детально изучаются механизмы их разрушения под воздействием высокотемпературных и химически активных сред [2–4]. Целью исследования является установление изменений параметров и состава плазмы в зоне разрушающего воздействия высокоэнтальпийной азотной плазменной струи, набегающей на образцы из углеродсодержащего материала. Созданный в ОИВТ РАН комплекс [4] обеспечивает получение и исследование плазмы различных газов (Ar, He, N₂, воздух) и их смесей в широком диапазоне температур (T = 10–30 кК), массовых расходов 0,2–5 г/с, скоростей 50–1000 м/с в выходном сечении плазмотронов. Экспериментальная оценка скорости потери массы материала образца в режиме реального времени выполняется методами двухпозиционной высокоскоростной видеосъемки и разработанного авторами метода лазерной профилометрии с использованием «лазерного ножа» [5]. В исследованиях использовались изотропный графит марки МПГ-6 цилиндрической формы с плотностью $\rho \approx 1,70\text{--}1,8$ г/см³ и анизотропный графит УПВ-1Т с плотностью $\rho \approx 2,1\text{--}2,2$ г/см³ в форме параллелепипеда с характерной толщиной 3–5 мм и стороной 15–25 мм. При удельных тепловых нагрузках 1–2 кВт/см² экспериментально установлены пространственно-временные изменения скорости убыли материала образцов (3–20 мг/см²с), температуры их поверхности (2000–3500 К), температуры электронов плазмы набегающего потока (6000–12000 К), плазмохимического состава в области «вдува» продуктов разрушения. Совместный анализ пространственно-временных изменений концентрации основных продуктов разрушения – атомов углерода и радикала CN и скорости убыли материала углеродсодержащего образца позволяет установить относительную роль процессов гетерогенной ($C_{solid} + N \rightarrow CN$) и гомогенной ($C_{gas} + N + M \rightarrow CN + M$) нитризации углерода в зоне взаимодействия.

Работа выполняется при частичной поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований по проектам No 16-08-00323 и No 17-08-00816.

-
1. Михатулин Д.С., Полежаев Ю.В., Ревизников Д.Л. Теплообмен, термохимическое и термоэрозийное разрушение тепловой защиты. М., Янус-К, 2011.
 2. Helber B., Turchi A., Scoggins J.B., Hubin A., Magin T.E. // Int. J. Heat. Mass. Tran. 2016. V. 100. P. 810.
 3. Lei L., Yiguang W., Liping L., Liyuang D., Guolin W., Yonghong L. // Carbon. 2016. V. 103. P. 73.
 4. Chinnov V.F., Tyuftyaev A.S., Kavyrshin D.I., Ageev A.G., Sargsyan M.A., Gadzhiev M.Kh. // High Temp. 2018. V. 56. No. 1. P. 25.
 5. Ageev A.G., Kavyrshin D.I., Sargsyan M.A., Gadzhiev M.Kh., Chinnov V.F. // Int. J. Heat. Mass. Tran. 2017. V. 107. P. 146.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИЗДЕЛИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ СЕЛЕКТИВНЫМ ЛАЗЕРНЫМ СПЛАВЛЕНИЕМ

Кашанов Н.Ф., Кашанов Р.Н., Кашанов Л.Н.*

Инженерный институт КФУ, Казань, Россия

**kashnail@gmail.com*

Аддитивные технологии (Additive Manufacturing) являются одним из наиболее динамично развивающихся направлений машиностроения. Они позволяют изготавливать любое изделие послойно на основе компьютерной 3D-модели: из «ничего» (а точнее, из расходного материала в виде порошка или полимерной «проволоки») «выращивается» новое изделие. В зависимости от технологии, объект может получать различные свойства, отличные от свойств первичного расходного материала.

Метод селективного лазерного сплавления (SLM), одна из технологий аддитивного производства, находит все большее применение в промышленности Республики Татарстана. Такие крупные предприятия, как ОАО «КАПО», ОАО «КМПО» и ОКБ «Сокол», начинают использовать данную технологию для создания из металлических порошков прототипов, мастер-моделей и пресс-форм для авиационной техники. Но для внедрения в производство данной технологии необходимо исследовать свойства изделий, полученных селективным лазерным сплавлением.

Наибольшее распространение в SLM-производстве получили порошки инструментальных и нержавеющей сталей. Одним из таких порошков является нержавеющая дисперсионно-твердеющая мартенситная сталь марки 17-4 PH (15-17,5 Cr, 3-5 Ni, 3-5 Cu, <1 Mn, Si, 0,15-0,45 Nb, баланс Fe). Сталь 17-4 PH в течение долгого времени была самой востребованной среди дисперсионно-твердеющих марок, благодаря гибкой вариативности своих свойств, и активно применялась в аэрокосмической и химической отрасли. Но существуют различия в теплофизических и физико-механических характеристиках между изделиями, созданными по SLM-технологии, и изделиями, выточенными на токарных станках.

Целью работы является исследование теплофизических и механических характеристик металлических изделий, полученных с помощью SLM-технологии из порошка стали 17-4 PH. Для этого решались следующие задачи: 1) формирование образцов из порошка стали 17-4 PH методом SLM; 2) проведение термической обработки образцов; 3) проведение исследований теплофизических и механических характеристик образцов до и после термической обработки; 4) определение оптимальных режимов SLM-процессов и термообработки.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ VOF ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ АБЛЯЦИИ ТЕПЛОЗАЩИТНОГО ПОКРЫТИЯ

Савицкий Д.В., Аксёнов А.А., Жлуктов С.В.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**dmvlsav@yandex.ru*

В работе представлена комплексная математическая модель, описывающая течение горячей смеси газов около спускаемого космического аппарата (СКА), унос массы с поверхности СКА, влияние продуктов абляции на процессы, протекающие в газовой фазе около СКА, прогрев теплозащитного покрытия (ТЗП) и изменение формы поверхности СКА. Моделируется обтекание образца углеродного ТЗП аргоновой плазмой. Условия соответствуют экспериментам, проведённым в ОИВТ РАН. Предполагается, что основным ме-

ханизмом абляции (уноса массы) является сублимация. Расчёты проводятся в программном комплексе FlowVision. Приводятся результаты численного моделирования. Проводится сравнение численных результатов с экспериментальными данными.

ОСОБЕННОСТЬ МОДИФИЦИРОВАНИЯ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ГРАФЕНОМ, СИНТЕЗИРОВАННЫМИ В СТРУЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ

Шавелкина М.Б., Амиров Р.Х., Тюфтяев А.С.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**mshavelkina@gmail.com*

Углеродные нанотрубки и графен обладают рядом уникальных свойств, поэтому создаваемые на их основе материалы находят применение в качестве структурных модификаторов конструкционных материалов. Цианат-эфирный пластик является современным и перспективным материалом. Термостойкость, низкая газо- и влагопоглощаемость, высокие диэлектрические свойства, низкое газовыделение, хорошая сопротивляемость к ионизирующему излучению и радиопрозрачность с учетом размеростабильных свойств делает цианат-эфирный пластик лучшим кандидатом для применения в космическом аппарато-строении и спутнико-строении. Были проведены исследования по встраиванию нитевидных углеродных нанотрубок и малослойного графена в полимерную сетку. Наноразмерные добавки были синтезированы в объеме плазменных струй гелия и аргона, что повлияло на их морфологию и свойства. В докладе представлены результаты по приготовлению и свойствам карбидкремниевых композитов, содержащих углеродные нанотрубки. SiC-керамика применяется в качестве теплозащитных, химически и эрозионно-стойких материалов, используемых, в основном, для создания авиационной и ракетной техники. Найдены режимы, при которых синтезированные нитевидные структуры собраны в жгуты, диаметром не более 100 нм. По технологии реакционно-связанного карбида кремния были изготовлены образцы карбидкремниевой керамики с добавкой углеродных жгутов в 0,01; 0,05; 0,1; 0,5 и 1,0 масс. Методом горячего прессования получена модифицированная керамическая композиция на основе кубического нитрида бора, используемая для изготовления обтекателей. В качестве наномодификаторов использован гидрированный графен, полученный при пиролизе ацетилена в аргоновой плазме. Получено наноструктурирование керамики за счет образования нитевидных наноструктур углерода диаметром 20-40 нм.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕНОСА И ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗРУШЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ ОБРАЗЦОВ В СВЕРХЗВУКОВОМ ПОТОКЕ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Глушнева А.В.,^{1,2} Савельев А.С.,^{1,2} Сон Э.Е.,^{1,2} Борейшо А.С.,³
Хомский М.Ю.,³ Васильев Д.Н.³*

¹МФТИ, Долгопрудный, Россия, ²ОИВТ РАН, Москва, Россия, ³ООО «НПП «Лазерные системы», Санкт-Петербург, Россия

**glushniova.alexandra@gmail.com*

В работе исследуется взаимодействие лазерного излучения с веществом в сверхзвуковом потоке. Излучение создается иттербиевым лазером с длиной волны 1070 нм и максимальной мощностью в 1 кВт. Диаметр луча в месте закрепления образца был 10 мм. Время

воздействия на образец варьировалось в диапазоне от 5 до 60 с. В качестве материала, на который воздействует излучение, был взят углерод. Геометрия образцов в эксперименте была двух видов: конус с углом раствора 40° и основанием диаметром 10 мм и цилиндр диаметром 10 мм. Образцы были закреплены в рабочей камере сверхзвуковой трубы (с числом Маха $M = 2$) на выходе из сопла Лавалья.

Эксперименты показали, что массоунос сильно зависит от структуры углеродного образца и для образцов различных структур может отличаться на порядок. Однако для образцов одной структуры прослеживается линейная зависимость массоуноса от времени воздействия, когда время воздействия превышает 20 с. Данные результаты согласуются с похожими работами по изучению массоуноса с поверхности образца из углерода [1]. В экспериментах, проводившихся без воздействия потока, массоунос с поверхности образца составляет лишь 30% от массоуноса в сверхзвуковом потоке, таким образом, сверхзвуковая аэродинамика значительно влияет на разрушение поверхности. Анализ интенсивности свечения образца показал, что температуры поверхности во время эксперимента превышает 2000 К.

-
1. Chinnov V.F., Tyuftyaev A.S., Kavyrshin A.G., Ageev A.G., Sargsyan M.A., Gadzhiev M.Kh.// High Temperature. 2016. V. 56. No. 1. P. 25–32.

**КАЛОРИМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВОГО
ПОВЕДЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ С НИЗКИМ
СОДЕРЖАНИЕМ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ (C4+) КОМПОНЕНТОВ.**

Булейко В.М., Григорьев Б.А.*

ООО "Газпром – ВНИИГАЗ Москва, Россия

**V_Buleiko@vniigaz.gazprom.ru*

В работе описана технология построения калориметрическими методами фазовых диаграмм пластовых флюидов. Локализация фазовых переходов осуществляется на основе прямых измерений термодинамических потенциалов и их температурных производных (изохорной теплоёмкости C_V , температурной производной давления при постоянном объёме $(\partial p/\partial T)_V$).

Представлены результаты экспериментальных исследований влияния сорбции и капиллярных явлений на фазовое поведение смесей n-алканов в пористых средах. Показано, что в результате избирательной адсорбции компонентов смеси происходит количественная и качественная трансформация её фазового поведения. Представлены результаты влияния воды на сорбционно-десорбционные процессы углеводородов. Изучена роль неравновесности системы в процессе выпадения и испарения конденсата в пористых средах и в свободном объёме. Показано, что определяющим фактором макроскопического расслоения жидкой и паровой фаз является размер поровых каналов продуктивного коллектора.

Исследовано гидратообразование углеводородов. Уточнены значения верхней и нижней квадрупольных точек. Локализована квинтипольная точка: в трёхкомпонентной системе (нормальный бутан, изобутан, вода) в равновесии находятся пять фаз (вода, лёд, гидрат, жидкие и газообразные бутаны). Показано, что термобарическая область существования гидрата смеси углеводородов распадается на области существования гидратов различных структур. Гидратообразование предваряется метастабильным состоянием системы вода-углеводороды. Установлено влияние термической предыстории воды на направление и кинетику процесса формирования льда или гидрата системы, находящейся в состоянии двойной метастабильности.

Построены фазовые диаграммы пластовых флюидов с низким конденсатным фактором. Экспериментально установлена их качественная и количественная трансформация по сравнению с традиционной фазовой диаграммой. Изучен вклад индивидуальных углеводородных компонентов в фазовое поведение смеси. Установлена зависимость конфигурации фазовой диаграммы углеводородной смеси с низким содержанием высокомолекулярных компонентов от содержания высокомолекулярных компонентов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ). Грант 16-08-00032 18.

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ 1-ПРОПАНОЛ —Н-ГЕКСАН

*Базаев А.Р., Базаев Э.А.**

ИПГ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

**emilbazaev@mail.ru*

По экспериментальным данным о p, ρ, T -зависимостях смеси 1-пропанола с н-гексаном состава 0,2, 0,5, 0,8 и 0,9 мольных долей н-гексана (x) в двухфазной, однофазной (газовой, жидкой), окологрнической и сверхкритической областях методом излома изохор [1, 2] определены параметры точек фазовых превращений жидкость-пар p_s, ρ_s, T_s и степенной функцией с учетом скейлингового поведения параметры критических точек p_k, ρ_k, T_k .

Зависимость давления от плотности, температуры и состава смесей вдоль кривой сосуществования фаз описана трехпараметрическим полиномиальным уравнением состояния—разложением фактора сжимаемости $Z = p/RT\rho$ в ряды по степеням приведенной плотности $\omega = \rho/\rho_k$, приведенной температуры $\tau = T/T_k$ и состава x вида:

$$Z = \frac{p}{RT\rho_m} = 1 + \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^s a_{ijk} \omega^i x^k / \tau^j,$$

откуда $p = RT\rho_m \left[1 + \sum_{i=1}^m \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^s a_{ijk} \omega^i x^k / \tau^j \right]$.

Средняя относительная погрешность отклонений рассчитанных значений давления от экспериментальных не превышает 1%.

Зависимость плотности смесей вдоль кривой сосуществования фаз вдали от критической точки и в симметричной ее части описана уравнениями вида:

$$\rho = \rho_k (1 \pm B_0 \tau^{\beta_0} + B_1 \tau^{\beta_1} \pm B_2 \tau^{\beta_2} + \dots),$$

$$(\rho_f - \rho_g) / 2\rho_k = B_0 \tau^{\beta_0} + B_2 \tau^{\beta_2} + B_4 \tau^{\beta_4} + \dots,$$

где $\tau = (T - T_k)/T_k$ и $\omega = (\rho - \rho_k)/\rho_k$.

Средняя относительная погрешность составляет 1,5%.

1. Базаев Э.А., Базаев А.Р., Джаппаров Т.А. Исследование фазовых переходов и критических свойств бинарных смесей этанол—н-алканы // Вестник Казанского технологического университета. 2010. №2. С. 242-249.
2. Базаев Э.А., Базаев А.Р., Карабекова Б.К. Фазовые превращения (жидкость—пар) и критические свойства смеси н-пропанол—н-пентан // Вестник Казанского технологического университета. 2014. Т. 17. № 21. С. 89-92.

ВЛИЯНИЕ ВЛАГИ НА ТЕПЛОПЕРЕНОС В ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДАХ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРЕВЕ ПРОВОЛОЧНОГО ЗОНДА

Лукьянов К.В., Котов А.Н., Старостин А.А., Скрипов П.В.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**r.t.f@bk.ru*

Быстрый локальный нагрев можно наблюдать в узлах трения с масляной смазкой, в циклах приготовления и горения топлива в двигателях и реактивных установках и других технологических установках. Как правило, в реальных процессах жидкие углеводороды могут содержать примеси влаги. Для исследования влияния влаги в предельных углеводородах использовалась методика мощного локального нагрева проволочного зонда.

Основная задача состояла в выяснении влияния примеси влаги на интенсивность нестационарного теплопереноса при нагреве зонда выше температуры нормального кипения компонентов. Проведены опыты на образцах гексана, декана, гексадекана с содержанием влаги от 5 до 35 ppm. Добавки влаги вводились из паровой фазы через свободную поверхность жидкости и контролировались методом Карла Фишера.

Оказалось, что в условиях импульсного нагрева малые примеси влаги способны оказывать значительное влияние не только на температуру вскипания углеводородов, но и на интенсивность теплопереноса этими веществами в состоянии перегрева, вблизи температуры спонтанного вскипания.

Работа проведена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-08-00381-а.

1. K.V. Lukynov, A.A. Starostin and P.V. Skripov. Heat transfer under high-power heating of liquids. 4. The effect of water admixtures on the heat transfer in superheated hydrocarbons// Int. J. Heat and Mass Transfer. - 2017. - V. 106. P. 657-665.
2. Лукьянов К.В., Котов. А.Н., Старостин А.А. Импульсно-тепловой контроль летучих примесей в диэлектрических технологических жидкостях. Датчики и системы. 2014. №10. С.46-49.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ В УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВАХ ПРИ ПЛЕНОЧНОМ И ПУЗЫРЬКОВОМ КИПЕНИИ

*Жуков С.А.,*² Яновский Л.С.,^{1,2} Молоканов А.А.,^{1,2} Ильина М.А.¹*

¹ЦИАМ, Москва, Россия, ²ИПХФ РАН, Черногоровка, Россия

**lapohka12@yandex.ru*

Вопросы передачи теплоты при кипении топлив представляют большой интерес для разработчиков авиационной техники. Теплопередача при кипении жидкости зависит от режима кипения. В пузырьковом режиме кипения тепловой поток в десятки раз больше, чем в пленочном при одинаковой температуре поверхности стенки. В настоящей работе проводились исследования процесса теплопередачи при кипении топлив в режиме сверхинтенсивного пузырькового кипения, а также в других режимах в условиях высокоплотного теплового потока [1]. В работе в качестве основного экспериментального метода применяли электротермографический метод с использованием платиновых нитей толщиной 100 мкм. Платиновая нить имеет сильную зависимость электросопротивления от температуры. Ее нагрев осуществлялся при постоянном электрическом токе и сопротивлении. Нагреватель, кроме своего прямого назначения, использовался в качестве термометра сопротивления. Снимая его вольтамперную характеристику и зная сопротивление при нуле градусов можно определять величину теплового потока и температуру поверхности. В качестве объектов исследования были взяты образцы авиационных керосинов. В ходе исследований были получены полные кривые кипения для температур жидкости 18 °С, 100 °С, и 184 °С. Обнаружено, что в условиях кипения с недогревом в системе реализуется режим СПК — сверхинтенсивного пузырькового кипения. В указанных условиях ветвь пузырькового кипения имеет необычный «ступенчатый» вид. Переходное (смешанное) кипение осуществляется в автоколебательном режиме. При достижении жидкостью температуры кипения вышеприведенные эффекты исчезают.

1. Concerning the Magnitude of the Maximum Heat Flux and the Mechanisms of Superintensive Bubble Boiling. Zhukov S.A., Afanas'eva S.Yu., Echmaev S.B. // International Journal of Heat and Mass Transfer. – 2003. – Т. 46. – № 18. – P. 3411-3427.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛЕТУЧИХ ПРОДУКТОВ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПИРОЛИЗА БИОМАССЫ

*Директор Л.Б., Синельщиков В.А.**

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**sinelshchikov@mail.ru*

При низкотемпературном пиролизе (торрефикации) биомассы в результате термической деструкции органической составляющей образуются летучие продукты, состоящие из неконденсирующихся газов и паров высокомолекулярных органических соединений. Для разработки технологий торрефикации и методов утилизации летучих продуктов, представляющих опасность для окружающей среды, необходимы данные по их теплофизическим свойствам.

Целью работы являлся расчет теплоемкости и теплоты сгорания летучих продуктов торрефикации, выделяющихся при нагреве биомассы до температуры 600 К. Данные по составу летучих продуктов, образующихся при различных температурах и временах выдержки, брались из [1]. В качестве параметра, определяющего состав и теплофизические свойства летучих продуктов, была принята величина массовых потерь при торрефикации, рассчитанная на сухое беззольное состояние исходной биомассы. В расчетах использовались значения теплоемкости и энтальпии образования органических компонентов, входящих в состав летучих продуктов торрефикации, из базы данных NIST [2]. При отсутствии соответствующих данных применялся метод групповых вкладов [3], суть которого состоит в том, что искомая теплофизическая величина вычисляется путем суммирования вкладов отдельных структурных и атомных групп, образующих рассматриваемое соединение.

В результате рассчитаны значения теплоты сгорания и температурные зависимости теплоемкости для летучих продуктов, образующихся в процессе торрефикации при массовых потерях до 17%. Максимальное отличие в значениях теплоемкости летучих продуктов, соответствующих различным массовым потерям, не превышало 6%.

1. Prins M.J., Ptasinski K.J., Janssen F.J.J.G. // *J. Anal. Appl. Pyrolysis*. 2006. V. 77. P. 35.
2. NIST Chemistry WebBook, <http://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser/>.
3. Joback K.G., Reid R.C. // *Chem. Eng. Commun.* 1987. V. 57. P. 233.

ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГОСТИ И КРИТИЧЕСКИХ ТЕМПЕРАТУР УГЛЕВОДОРОДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ МАНОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

*Яновский Л.С.,^{1,2} Варламова Н.И.,¹ Казаков А.И.,² Молоканов А.А.,^{*1,2}
Плишкин Н.А.,² Попов И.М.,¹ Ильина М.А.,¹ Ежов В.М.¹*

¹ЦИАМ, Москва, Россия, ²ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

**molokanov@ciam.ru*

В настоящее время отсутствуют экспериментальные данные по теплофизическим свойствам некоторых углеводородных соединений, перспективных для применения в качестве авиационных топлив. Настоящая работа посвящена исследованию теплофизических свойств и критических температур углеводородных соединений манометрическим методом, а также оценке выполнения закона Рауля для смесей углеводородных соединений. В качестве объектов исследования были взяты алифатические циклические углеводороды, обладающие высокой плотностью, объемной теплотой сгорания и высокой температурой кипения, что позволяет рассматривать их в качестве перспективных компонентов авиационных топлив. В работе использовали экспериментальную манометрическую установку,

включающую термостат, систему регулирования давления, испытательную камеру, позволяющую определять давление паров исследуемого образца при давлениях от 0 до 45 атм при температурах от 15 °С до 500 °С [1]. Исследование упругости образцов проводили путем измерения равновесного давления в процессе их изохорического нагревания. При каждом определении давления испытательную камеру выдерживали при заданной температуре в течение 2 часов, давление при этом не изменялось, т.е. реакция термического разложения с выделением газов не наблюдалась. Установлено, что давления насыщенного пара исследованных образцов в интервале 100-400 °С подчиняются закону Клапейрона-Клазиуса. Для исследованных образцов углеводородных соединений определены зависимости упругости паров от температуры, энтальпии и энтропии испарения, температуры кипения и критические температуры.

1. В.В. Дубихин, В.Г. Матвеев, Г.М. Назин. Термическое разложение 2,4,6-тринитротолуола в расплаве и растворах // Известия Академии наук. – 1995. – № 2. – С. 266 - 271.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕТАНА С ПЛАЗМОЙ УГЛЕКИСЛОГО ГАЗА, ПОЛУЧЕННОЙ В ВЫСОКОВОЛЬТНОМ ПЛАЗМОТРОНЕ ПЕРЕМЕННОГО ТОКА

*Субботин Д.И.,^{*1,2,3} Попов В.Е.,¹ Сафронов А.А.,¹ Попов С.Д.,¹ Суров А.В.,¹
Кучина Ю.А.,¹ Образцов Н.В.,¹ Серба Е.О.,¹ Наконечный Г.В.,¹ Сподобин В.А.¹*

¹ИЭЭ РАН, Санкт-Петербург, Россия, ²СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия,

³СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, Россия

*subbotin1987@mail.ru

В настоящее время актуальной является проблема получения синтез-газа из природного газа (риформинг). Основными реагентами в этом случае являются водяной пар, углекислый газ и кислород. Углекислый газ является парниковым газом, поэтому его выбросы в атмосферу должны быть ограничены. Однако, взаимодействие метана с углекислым газом является сильным эндотермическим процессом. Существует ряд научных работ посвященных взаимодействию CO₂-плазмы с метаном. Для этого используются DBD, коронный разряд, дуговой разряд постоянного тока. В работе рассматривается взаимодействие метана с углекислым газом в высоковольтном трехфазном плазмотроне переменного тока. Источник питания плазмотрона состоит из токоограничивающих реакторов, компенсатора реактивной мощности и высоковольтного трансформатора (10 кВ). Плазмотрон состоит из трех дуговых каналов с тремя стержневыми медными электродами. В приэлектродную зону подается углекислый газ (3,7 г/с) и метан (1 г/с), а в зону дуги подается углекислый газ (3,2 г/с) и метан (1,4 г/с). Электрическая мощность плазмотрона составила 110 кВт. Состав синтез-газа определялся масс-спектрометром с использованием калибровочных смесей. Синтез-газ содержал по 50 процентов объемных CO и H₂ без образования сажи. Это свидетельствует о высокой эффективности переработки метана в синтез-газ.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОНЕНТОВ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА И СЫРЬЯ ДЛЯ ЕГО ПРОИЗВОДСТВА

Никитин Е.Д., Богатищева Н.С., Попов А.П., Файзуллин М.З.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**e-nikitin@mail.ru*

Биодизельное топливо является возобновляемым источником энергии и имеет ряд преимуществ перед дизельным топливом, произведенным из нефти. Биодизель является смесью метиловых или этиловых эфиров жирных кислот и производится из триглицеридов этих кислот, которые содержатся в растительных маслах и животных жирах.

В докладе приведены результаты измерений критической температуры T_c , критического давления p_c , теплоемкости C_p и температуропроводности метиловых, этиловых эфиров и триглицеридов жирных кислот. Эти свойства измерены для следующих соединений:

- метиловых эфиров *n*-алкановых кислот $C_nH_{2n-1}O_2$ с числом атомов углерода в материнской кислоте $n = 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$, а также олеиновой, линолевой, линоленовой и эруковой кислот;

- этиловых эфиров *n*-алкановых кислот $C_{2n}H_{4n-2}O_2$ с числом атомов углерода в материнской кислоте $n = 10, 11, 12, 14, 16, 18$;

- триглицеридов *n*-алкановых кислот $C_3H_5[O_2C_nH_{2n-1}]_3$ с числом атомов углерода в материнской кислоте $n = 8, 10, 12, 14$.

Чистота исследованных образцов (Alfa Aesar, Sigma-Aldrich) составляла 98,5–99,9 мол. %.

Исследованные соединения являются термонестабильными при окологкритических температурах, поэтому измерения выполнены методом импульсного нагрева, разработанным авторами (ГСССД 163-2010). Метод обеспечивает сверхмалое разложение веществ в процессе измерений. Погрешности измерения критических параметров: $\delta p_c = 0,03p_c$ и $\delta T_c = 0,01T_c$, где T_c — абсолютная температура. Получены уравнения для расчета критических параметров метиловых и этиловых эфиров *n*-алкановых кислот.

Теплоемкость измерялась с помощью дифференциального сканирующего калориметра DSC 204 F1 Phoenix (Netzsch) с погрешностью 2%. Измерения коэффициента температуропроводности были выполнены методом лазерной вспышки на установке LFA 457 MicroFlash (Netzsch); погрешность измерения — не более 5%.

Работа выполнена при финансовой поддержке комплексной программы фундаментальных исследований Уральского отделения РАН (проект № 18-2-2-13).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СКОРОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ УГЛЕВОДОРОДНОЙ СМЕСИ В СВОБОДНОМ ОБЪЕМЕ

*Богданов А.В.,¹ Григорьев Е.Б.,¹ Сокотущенко В.Н.*²*

¹ООО «Газпром ВНИИГАЗ», п. Развилка, Россия, ²Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

**sokotushenko@mail.ru*

Для изучения процессов фазового перехода при интенсивном снижении давления в газоконденсатных системах [1–3] проведена серия экспериментов по резкому снижению и повышению давления в ячейке PVT на различные величины относительно первоначального давления, соответствующего равновесному газовому состоянию. Основные контролируемые в ходе исследования параметры — текущее давление в рекомбинаторе и температура.

Эксперименты по определению времени релаксации фазовых переходов выполнялось статическим методом. В этом случае фазовый переход происходил в неподвижном газе в замкнутом объеме.

В рамках математической постановки задачи, из системы уравнений движения флюида получено одно разрешающее уравнение относительно скоростей фаз. Представлен расчет термодинамических свойств (ТДС) многокомпонентной углеводородной смеси при изменении объема (адиабатическом сжатии–расширении) и резких перепадах давления в ячейке рекомбинатора, а также определено время релаксации фазовых переходов на примере 4-х компонентной смеси: C_4H_{10} - C_3H_8 - C_5H_{12} - C_7H_{16} .

Сравнение полученного распределения давления по разработанной математической модели на граничных сечениях ячейки рекомбинатора с полученными из эксперимента данными по замерам давления в соответствующих точках ячейки рекомбинатора дает ошибку менее 5%, что является удовлетворительным результатом по апробации математической модели.

1. Григорьев Б.А., Герасимов А.А., Григорьев Е.Б. Фундаментальные уравнения состояния углеводородов в критической области. Межотраслевой научно-технический журнал. Оборонный комплекс – научно-техническому прогрессу России. 2010. № 3. С.52-60.
2. Булейко В.М., Вовчук Г.А., Григорьев Е.Б., Федосеев А.П. Экспериментальное исследование термодинамических свойств газовых гидратов в пористых средах при термобарических условиях, соответствующих жидкому состоянию углеводородных гидратообразующих компонентов. Вести газовой науки: Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов. — М.: Газпром ВНИИГАЗ. 2013. №1(12).
3. Григорьев Б.А., Зайченко В.М., Молчанов Д.А., Сокотущенко В.Н. Математическое моделирование процессов изотермической фильтрации газоконденсатной смеси при различных режимах течения. Вести газовой науки: Актуальные вопросы исследований месторождений углеводородов. — М.: Газпром ВНИИГАЗ, 2016. — №4(28). — С.37-40.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕГРЕВА И КРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ПРИ ДОБАВЛЕНИИ КАСТОРОВОГО МАСЛА

Игольников А.А., Скрипов П.В.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**alexander.igolnikov@bk.ru*

Добыча и использование невозобновляемых источников энергии, таких как нефть и газ, наносят вред окружающей среде. В этой связи, разрабатываются альтернативные источники энергии, одним из которых является биотопливо. Оно представляет собой смесь метиловых или этиловых эфиров жирных кислот, а его производство основано на переработке различных масел растительного происхождения. Использование биотоплива в качестве добавки к дизельному топливу или его альтернативы в двигателях внутреннего сгорания позволяет уменьшить выбросы углекислого газа, а также окислов азота и серы. Кроме того, такое топливо полностью разлагается в окружающей среде под действием бактерий, вследствие чего оно не причиняет вреда растениям и животным.

В докладе будут представлены результаты измерений достижимого перегрева и критических параметров растворов касторового масла в дизельном топливе при различных концентрациях касторового масла. Исследуемые образцы являются термонеустойчивыми соединениями. В этой связи, измерения проводились методом импульсного нагрева вещества с характерным временем нагрева в 1 миллисекунду.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-08-00381-а и комплексной программы Президиума УрО РАН, проект 18-2-2-3.

СВОЙСТВА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ, УЧАСТВУЮЩИХ В ПРОЦЕССЕ ПОЛУЧЕНИЯ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА В СУБ- И СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ФЛЮИДНЫХ УСЛОВИЯХ

Зарипов З. И., Усманов Р.А., Гумеров Ф.М.*

КГТЛУ, Казань, Россия

**zufar_zaripov@mail.ru*

Безкаталитическая трансэтерификация растительных масел в среде сверхкритических спиртов становится одним из перспективных способов производства биодизельного топлива [1]. Технологические процессы, протекающие в установках производства биодизеля, предполагают количественный анализ тепловых эффектов процесса трансэтерификации растительных масел в среде сверхкритических спиртов. Наряду с этим, для моделирования и оптимизации технологических процессов производства биодизельного топлива в ходе реакции трансэтерификации, проводимой в суб- и сверхкритических условиях, необходимо располагать термодинамическими свойствами исходных компонентов (особенно при до- и сверхкритических состояниях реагирующего спиртового компонента) и продуктов реакции.

Теплофизические свойства основных компонентов реакции трансэтерификации и продуктов реакции достаточно подробно представлены в отечественной и зарубежной литературе. Вместе с тем отсутствуют данные о свойствах смесей компонентов реакции и тепловых эффектах реакции трансэтерификации. Обширные исследования термодинамических свойств, проведенные на кафедре теоретических основ теплотехники ФГБОУ ВО «КНИТУ» [2–4], позволили охватить всю цепочку процесса получения биодизельного топлива в суб- и сверхкритических флюидных условиях (подготовку, смешение, реакцию и разделение). На основе этого материала появилась возможность перейти к моделированию и оптимизации технологического процесса и выйти к проектированию промышленной установки получения биодизельного топлива.

1. Гумеров, Ф. М. и др. // Сверхкритические флюиды. Теория и практика. 2006. Т.1. №1. С.66-76.
2. Усманов Р.А., Габитов Р.Р., Бикташев Ш.А. и др. // Сверхкритические флюиды. Теория и практика. 2011. Т.6. №3, С. 45-61.
3. Usmanov R.A., Gumerov F.M., Gabitov F.R., Zaripov Z.I., Scshamsetdinov F.N., Abdulagatov I.M. Liquid Fuels: Types, Properties and Production. Nova Science Publisher, Inc., New York, 2012, Chapter 3, P. 99-146.
4. Гумеров Ф.М. Биодизельное топливо. Переэтерификация в сверхкритических флюидных условиях. Монография. - Казань: Издательство ООО «Инновационно-издат. дом» «Бутлеровское наследие», 2017. 360с.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОЦЕССА ЭКСТРАКЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ ИЗ НЕФТЯНЫХ ШЛАМОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СКФ ПРОПАН-БУТАНОВОЙ СМЕСИ

Хайрутдинов В.Ф.,^{1,2} Гумеров Ф.М.,¹ Фарахов М.И.²*

¹ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия, ²ООО «ИВЦ «Инжесхим», Казань, Россия

**kvener@yandex.ru*

На сегодняшний день предприятиями нефтегазового комплекса России накоплено огромное количество нефтяных отходов. По самым скромным подсчетам, ежегодное увеличение их количества составляет около 3 млн. т. В последние годы нефтедобывающими предприятиями в производство внедряются различные технологические решения, направ-

ленные на утилизацию отходов нефтедобычи и подготовки нефти. Однако, достаточно эффективный и унифицированный способ переработки нефтешламов с целью их обезвреживания и утилизации до сих пор отсутствует.

В рамках исследования утилизации нефтешламов использовано сырье, характеризующиеся содержанием механических примесей и воды в количестве 12,05% и 20,0% масс. соответственно. В качестве экстрагента использована смесь, состоящая из 75,0 мас. % пропана и 25,0 мас. % бутана. Экстракционные процессы осуществлены в температурном диапазоне 85–160 °С и интервале давлений 5–50 МПа. Выделенный нефтепродукт характеризуется отсутствием механических примесей, асфальтенов и воды. Определены первая (5,0–6,5 МПа) и вторая (11–12 МПа) кроссоверные точки изотерм растворимости исследованных нефтепродуктов в пропан–бутановом растворителе. Знание кроссоверных точек является важным условием при осуществлении процессов экстракции и пропитки.

Для масштабирования полученных результатов необходимо моделирование процесса, а для моделирования необходимо исследовать термодинамические свойства систем участвующих в процессе. С этой целью проведены исследования растворимости чистых компонентов нефтяного шлама, таких как нафталин, антрацен и др., в субкритическом флюидном (СбКФ) и СКФ пропан–бутане.

С учетом исследований термодинамических свойств и лабораторных исследований осуществлено моделирование процессов.

По результатам моделирования создана пилотная установка, позволяющая осуществить процессы экстракции и импрегнации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-19-00478).

-
1. Khairutdinov V. F., Akhmetzyanov T. R., Gabitov F. R., Zaripov Z. I., Farakhov M. I., Mukhutdinov A. V., Gumerova F. M., and Yarullin R. S. Extraction of oil-products from oil sludge with the use of liquid and supercritical fluid extraction processes with propane-butane extractant. *Petroleum Science and Technology*, V 34, №4, 2016, p. 372-378.

ОПТИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОГРАНИЧНЫХ КРИВЫХ ОКОЛОКРИТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ

Кияченко Ю.Ф., Дешабо В.А., Косов В.И., Юдин Д.И., Юдин И.К.,
Поднек В.Э.*

ИПНГ РАН, Москва, Россия

**kiyatchenko@mail.ru*

Излагается методика оптического определения пограничной кривой и положения критической точки жидкость – газ околокритических многокомпонентных углеводородных смесей, моделирующих газоконденсатные месторождения переходного типа. Работа является частью комплексного исследования фазового поведения модельных околокритических углеводородных смесей, включающего помимо экспериментальных методов рассеяния света калориметрические и PVT-измерения. Разработана оптическая ячейка высокого давления и создана установка для измерения интенсивности релеевского рассеяния света в углеводородных смесях при температуре от 10 до 120 °С и давлении до 50 МПа. Объем измерительной ячейки составляет 3.2 см³. Интенсивность светорассеяния измеряется под углом 45°. В качестве источника света используется лазер с длиной волны 635 нм. Калибровка измерительной системы проводилась на критической изохоре двуокиси углерода. Измерения интенсивности светорассеяния проводились вдоль изохор при охлаждении из однофазной области. Положение пограничной кривой углеводородной смеси определялось

по изменению характера температурной зависимости интенсивности рассеянного света при переходе из однофазного в двухфазное состояние. Положение критической точки определялось по максимуму интенсивности светорассеяния на пограничной кривой. Температурная зависимость аномалии интенсивности светорассеяния в однофазной области анализировалась в рамках обобщенной «линейной модели» – скейлингового параметрического уравнения состояния околокритического флюида. Представлены результаты экспериментального изучения околокритического фазового поведения бинарной смеси метан-пентан (50/50 весовых процента). Проведено сравнение критических параметров указанной смеси с определенными ранее PVT методом в работе Sage *et al.* (1942) и даваемыми инженерными программами расчета теплофизических свойств углеводородных смесей PVTsim (Calsep) и REFPROP (NIST).

ГИДРАТООБРАЗОВАНИЕ В СВЕРХЗВУКОВЫХ СТРУЯХ ВОДЯНОГО ПАРА И ГАЗА

Файзуллин М.С., Виноградов А.В., Томин А.С., Коверда В.П.*

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**andrey.itf.2017@yandex.ru*

Цель настоящей работы — экспериментальное исследование формирования газовых гидратов при конденсации нанокластеров в сверхзвуковых молекулярных пучках разреженного водяного пара и газа в вакууме.

Формирование газового гидрата наблюдали в вакуумной камере с охлаждаемыми жидким азотом стенками. Давление в камере перед опытом не превышало 10^{-3} мм рт. ст. Встречные молекулярные пучки разреженного пара и этана одновременно поступали в камеру через сопла Лаваля, которые разгоняли их до сверхзвуковой скорости. Адиабатическое расширение молекулярного потока разреженного пара на выходе из сопла обеспечивает понижение температуры и образование кристаллических нанокластеров льда кубической алмазоподобной структуры. Образование кластеров льда сопровождается захватом молекул газа и формированием кристаллогидратной фазы. Изменением давления на входе в сверхзвуковое сопло регулировали расход пара и, как следствие, производительность газового гидрата. Охлаждение стенок камеры жидким азотом позволяло сохранять его неограниченное время.

При нагревании кристаллический конденсат сохранялся вплоть до температуры плавления образца. Самоконсервация обеспечивала его устойчивость в метастабильном состоянии при температурах значительно выше равновесной температуры диссоциации гидрата этана.

Содержание газа в закристаллизованном водно-газовом продукте превышало 50 масс. %. Такое содержание достигалось за счет дополнительной сорбции газа при образовании кристаллического конденсата, который представлял собой насыщенную газом нанопористую среду, содержащую кристаллогидратную фазу и кристаллический лед.

Результаты этих опытов представляют интерес в связи с разработкой экономичных и безопасных технологий хранения и транспорта газов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 18-08-00352-а, № 18-38-00443 мол-а) и Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 18-2-2-3).

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНОЕ ОРГАНИЧЕСКОЕ СОЕДИНЕНИЕ (НЕФТЬ) -ВОДА-СКФ РАСТВОРИТЕЛЬ

Накипов Р.Р., Зарипов З.И.*

КГТУ, Казань, Россия

**naki88@yandex.ru*

Нынешняя тенденция в нефтеперерабатывающей промышленности — это использование тяжелых нефтей. Из-за более высокого содержания гетероатомов, асфальтенов и металлов, а также большего количества не разделяющихся углеводородов, ее труднее перерабатывать.

Проблемы рационального использования и переработки трудно извлекаемых запасов высоковязких нефтей и природных битумов невозможно решить без внедрения широкого спектра современных технологий добычи и переработки.

На этом фоне все актуальнее становятся проблемы рационального использования и переработки трудно извлекаемых запасов, таких, как высоковязкие нефти и природные битумы. Эти проблемы невозможно решить без внедрения современных технологий добычи, таких как паротепловые, холодная добыча, с использованием растворителей и катализаторов, а также переработки углеводородного сырья с применением сверхкритических флюидных (СКФ) технологий.

Теплофизические свойства тяжелых нефтей и битумов являются необходимыми исходными данными для разработки, проектирования технологических процессов, мероприятий, связанных с их производством, транспортировкой и переработкой нефти. Для разработки и оптимизации технологических процессов переработки нефти необходимы знания фазового поведения, теплофизических свойств (теплопроводности, теплоемкости, плотности, вязкости и состава) как самих нефтей и фракций, так и их смесей с растворителями. Исследованиями в этом направлении занимаются достаточно много, это и работы по фазовым равновесиям, составам и свойствам.

Целью настоящего исследования является получение новых данных по теплофизическим свойствам высоковязкой нефти Ашальчинского месторождения.

Исследование теплофизических свойств (теплоемкости) систем тяжелой нефти и водонефтяной эмульсии различной концентрации СКФ (пропан-бутан) проведены в интервале температур 343–474 К и давлений в диапазоне 4,9–29,4 МПа. Теплоемкость системы была измерена на сканирующем адиабатическом калориметре ИТ-С-400.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-19-00478).

СОСТАВ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ИНИЦИИРОВАНИИ ГОРЮЧИХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ В КОНТРОЛИРУЕМЫХ УСЛОВИЯХ

*Анищенко Ю.В., Локтионов Е.Ю.**

МГТУ, Москва, Россия

**stcpe@bmstu.ru*

Одним из главных преимуществ лазерного зажигания является возможность инициирования бедных горючим смесей, в результате чего имеет место очевидная экономия и уменьшение вредных выбросов, прежде всего NO_x . Экспериментальные данные о составе продуктов сгорания представлены в литературе очень слабо. Как правило, исследования не носили систематического характера, затрагивали только очень специфические условия

воздействия и состав горючих смесей (преимущественно метано-воздушных) и были получены для экспериментальных двигателей сгорания, конструктивные и эксплуатационные особенности которых могли существенно повлиять на получаемый результат.

Существует ряд моделей, позволяющих рассчитать состав продуктов сгорания, однако они созданы либо без учета механизма инициирования, либо для электроискрового зажигания, либо воспламенения сжатием. Для лазерного зажигания известно, что образование ядра горения происходит быстрее, чем от электрической искры. Мы предположили, что для получения отправной точки для последующей оптимизации, следует провести исследование состава продуктов сгорания в условиях минимального воздействия со стороны конструкции двигателя. Для этого был создан экспериментальный стенд, позволяющий исследовать лазерное зажигание горючих смесей различного состава в широком диапазоне давлений. Его особенностью применительно к данной работе является наличие узла для накопления продуктов сгорания после серии воздействий, который сообщается с камерой сгорания через сбросной клапан. Посредством последнего моделируется увеличение рабочего объема цилиндра и реализуется защита от чрезмерного роста давления.

Нами исследовано лазерное зажигание газовых смесей на основе водорода, метана, пропана и бутана при коэффициентах избытка воздуха $\alpha \sim 0,5-2,0$ в диапазоне давлений $p \sim 1-3$ бар, инициируемых излучением 1й–5й гармоник наносекундного Nd:YAG лазера. Состав продуктов сгорания анализировался по O_2 , CH , CO , CO_2 , NO_x . Проанализировано соответствие полученных результатов, известных из других экспериментальных и теоретических работ.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДАВЛЕНИЯ СИСТЕМЫ Н-ГЕПТАН - ВОДА (99:1)

Мирская В.А., Назаревич Д.А., Ибавов Н.В.*

ИФ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

**naz_77@mail.ru*

В настоящее время актуально исследование комплекса теплофизических свойств жидкостей и газов в условиях одной экспериментальной ячейки. В процессе одного эксперимента можно получить информацию о широком спектре теплофизических свойств веществ. Объединение измерений теплофизических и калорических свойств в рамках одной экспериментальной установки — достаточно сложная задача.

Для выполнения условия одновременного измерения изохорной теплоёмкости и давления в составе экспериментальной установки для исследования изохорной теплоёмкости и PVT-свойств жидкостей и газов было решено использовать цифровой тензометрический датчик.

Датчик должен обладать следующими характеристиками: высокой точностью; небольшими массогабаритными размерами; большими диапазонами измеряемых давлений и температур исследуемых сред; независимостью результатов измерений от состояния окружающей среды (температуры, влажности воздуха и т.п.). Таким параметрам удовлетворяет датчик давления Курант ДИ-В.

Данные о давлении исследуемой системы от датчика передаются на цифровой измерительный прибор (мультиметр Keithley 2000). От мультиметра полученные данные поступают в персональный компьютер со специально разработанным авторами программным обеспечением, где они обрабатываются и сохраняются вместе с другими данными.

Описанным способом нами была исследована система н-гептан–вода (99:1). Данная система является несмешивающейся при нормальных условиях. Исследования проводили по 11 изохорам в интервале плотностей от 150 кг/м^3 до 501 кг/м^3 и диапазоне давлений от

0,1 МПа до 16,0 МПа. Построены изохоры давления, а также зависимости первой производной давления по температуре от температуры, на которых явно отмечаются фазовые переходы, соответствующие переходам из трехфазного состояния в двухфазное и из двухфазного в однофазное.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ №17-08-00800).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗОБАРНОЙ ТЕПЛОЁМКОСТИ РЕАКЦИОННОЙ СМЕСИ «ЭТАНОЛ/РАПСОВОЕ МАСЛО» В ПРИСУТСТВИИ ГЕТЕРОГЕННОГО КАТАЛИЗАТОРА

Мазанов С.В., Зарипов З.И., Гумеров Ф.М.*

КНИТУ, Казань, Россия

**serg989@yandex.ru*

Проведены измерения изобарной теплоемкости этанола и смеси «этанол/рапсовое масло» в присутствии гетерогенного катализатора Al_2O_3 при исходных мольных соотношениях 6:1–30:1 в интервале давлений 9,8–29,4 МПа и температурах от 303 К до 563 К на экспериментальной установке, созданной на базе сканирующего калориметра ИТ-с-400. Для более эффективного перемешивания плохо смешивающихся реагентов перед их подачей в измерительную ячейку и систему поддержания давления использован ультразвуковой эмульгатор UIP1000hd немецкой фирмы Hielscher. Определена зависимость изменения изобарной теплоёмкости во всем диапазоне исследованных давлений и исходных мольных соотношений с повышением температуры. Предварительная обработка смеси в ультразвуковом диспергаторе приводит к смещению области скачка теплоемкости в более низкий диапазон температур. С увеличением давления и концентрации масла величина теплового эффекта реакции уменьшается. Теоретическое обоснование проявляемых скачков роста и падения значений изобарной теплоёмкости исходной смеси проанализировано по методу Shaw [1].

-
1. Lastovka, V. A similarity variable for estimating the heat capacity of solid organic compounds. Part II. Application: Heat capacity calculation for ill-defined organic solids / V. Lastovka, M. Fulem, M. Becerra, J.M. Shaw // Fluid Phase Equilibria. – 2008. – №268. – P. 134–141.

ВЯЗКОСТЬ И ПЛОТНОСТЬ ВАКУУМНЫХ МАСЕЛ ДЛЯ ДИФФУЗИОННЫХ НАСОСОВ

Сагдеев Д.И., Габитов И.Р., Фомина М.Г., Аляев В.А., Минкин В.С.,
Абдулагатов И.М.*

ФГБОУ ВО КНИТУ, Казань, Россия

**sagdeev@mail.ru*

Представлены результаты исследования вязкости и плотности четырех вакуумных масел для диффузионных вакуумных насосов отечественного и зарубежного производства. Измерение свойств проведены при атмосферном давлении: вязкость методом капилляра, а плотность — методами пикнометра и гидростатического взвешивания. Идентификация образцов вакуумных масел была произведена методом ядерного магнитного резонанса. Имеется достаточно хорошая корреляция структуры масел с их вязкостью и плотностью.

Представлены расчетные выражения и вычислены оценки погрешности плотности гидростатическим методом и вязкости методом капилляра. Температурная зависимость вязкости представлена с помощью известного уравнения типа Аррениуса–Андрэде, а для плотности использована квадратичная функция по абсолютной температуре.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №18-19-00478).

1. Sagdeev D.I., Fomina M.G., Alyev V.A., Musin R.Z., Abdulagatov I.M. Density of working liquids for diffusion vacuum pumps. *J. Chem. Eng. Data*, 2018, т.63, 1698-1705.
2. Леше А. Ядерная индукция. - Пер. с немецкого под редакцией П.М. Бородина. - М.: Издательство иностранной литературы, 1963. - 684 с.
3. МИ 2083-90 ГСИ. Измерения косвенные. Определение результатов измерений и оценивание их погрешностей. - Введ. с 01.01.92. - 10 с.

ИЗОХОРНАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ И РVT СВОЙСТВА БИНАРНОЙ АЗЕОТРОПНОЙ СИСТЕМЫ Н-ГЕПТАН-ВОДА

Ибавов Н.В., Мирская В.А., Назаревич Д.А.*

ИФ ДНЦ РАН, Махачкала, Россия

**nabi79@mail.ru*

Результаты изучения явления азеотропии в сложных системах представляют интерес при разработке технологий процессов экстракционной, азеотропной перегонки и получения из нефти химических соединений высокой чистоты. Выделение высококипящих фракций из углеводородного сырья осуществляется азеотропной перегонкой с применением водяного пара.

Исследуемая система н-гептан–вода $[(1-x)C_7H_{16}+H_2O]$ (x, содержание полярного компонента) является представителем сложных систем углеводород–вода, состоящих из компонентов, существенно различающихся по молекулярному строению и свойствам.

Исследования проведены на автоматизированной экспериментальной установке, используя известную методику высокотемпературного адиабатного калориметра–пьезометра Х.И. Амирханова.

Температурные и объемные зависимости теплофизических свойств системы $[(1-x)C_7H_{16}+H_2O]$ определены для нескольких постоянных составов $0,147 \leq x \leq 0,420$ м.д. с различным содержанием полярного компонента (воды) в интервале температур от нормального кипения компонентов до 570 К. Для каждой системы постоянного состава $x=\text{const}$ измерения проводили по 7–12 изохорам $\rho=\text{const}$.

В результате исследования обнаружены особенности поведения теплофизических свойств, позволившие определить границы фазовых равновесий, области взаимной растворимости компонентов, зависимость состава азеотропа от температуры и давления для данной системы.

Исследования проводятся при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-08-00800-а).

DATA DRIVEN APPROACHES IN MATERIALS
DESIGN: THEORY MEETS EXPERIMENT
(MISIS)

**ENTHALPIES OF FORMATION OF TRANSITION METAL AND
RARE-EARTH BORIDES. A FIRST PRINCIPLES STUDY.**

*Colinet C.,^{*1} Tedenac J.P.²*

¹*Université de Grenoble Alpes, Saint Martin d'Hères, France,* ²*Université Montpellier II,
Montpellier, France*

**ccolinet@simap.grenoble-inp.fr*

Calculations based on the density functional theory have achieved considerable reliability for the prediction of the properties of materials. In the present work, we have studied the structural stability of binary intermetallic compounds of boron with transition metals and rare-earth elements. The density functional (DFT) calculations have been performed with the Vienna *ab initio* simulation package (VASP) [1], making use of the projector augmented waves (PAW) technique [2, 3]. For the generalized gradient approximation (GGA) exchange correlation functional, we have used the Perdew-Burke-Ernzerhof parameterization (PBE) [4].

The calculated values of the lattice parameters at $T = 0$ K of the stable compounds agree well with the experimental values [5]. The calculated enthalpies of formation of these compounds are compared to the values obtained with calorimetric methods [6, 7]. In the whole, the calculated values of the formation enthalpies of formation the borides in their ground state are in good agreement with the experimental ones when available. The calculated values have also been compared with those previously published in various publications or data bases. Finally, the evolution of the enthalpies of formation of the borides along the 3d, 4d, and 5d series of the transition metals and the series of rare-earth Sc, Y, La and La to Gd to Lu is discussed.

-
1. G. Kresse and J. Furthmüller, *Comp. Mater. Sci.* 6 (1996) 15; *Phys. Rev. B* 54 (1996) 11169.
 2. P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 17953.
 3. G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* 59 (1998) 1758.
 4. J.P. Perdew, S. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996) 3865–3868.
 5. P. Villars and K. Cenzual, *Pearson's Crystal Data - Crystal Structure Database for Inorganic Compounds*, Release 2014/15, ASM International, Materials Park, Ohio, USA.
 6. S.V. Meschel and O.J. Kleppa, *J. Alloys and Compounds*, 321 (2) (2001) 183-200.
 7. G. Kim, S. V. Meschel, P. Nash, and W. Chen, *Sci. Data* 4:170162 doi: 10.1038/sdata.2017.162 (2017).

**MODELLING OF PHASES WITH GENERAL NIAS-TYPE STRUCTURE:
WHAT CAN WE LEARN FROM POWDER XRD?**

Richter K. W.

University of Vienna, Faculty of Chemistry, Wien, Austria

klaus.richter@univie.ac.at

The general NiAs structure includes the related structure types CdI₂, NiAs and Ni₂In. It is composed of transition metals T and main group elements B, out of the 13th to 16th group, forming T1+/-xB structures. Due to its ability to include different amounts of transition metal, large homogeneity ranges can be found between T0.5B and T2B. The structure type is widespread among transition metal compounds and therefore present in many different alloy

systems. In higher order systems, little is known about occurrence and homogeneity ranges of corresponding solid solution phases. Extrapolations using the Calphad approach are therefore often the method of choice for the prediction of multicomponent systems. For consistent models, however, a detailed knowledge of the underlying crystal chemistry is necessary.

To contribute to this knowledge, some selected ternary model systems were investigated experimentally in a current research project. The NiAs-type solid solutions were characterized by detailed Rietveld refinements of XRD powder patterns. This data helped to clarify open questions regarding the possibility of transition metal ordering and the maximal extension of a continuous phase field. Based on these results, a modified sublattice model for phases with general NiAs structure is proposed. Three endmembers of this model correspond to the boundary structures of the general NiAs type (CdI₂, NiAs, Ni₂In) so the end member energies can easily be calculated by DFT calculations. This was demonstrated by calculating a small database of energies of formation of (hypothetic) binary Ni-containing NiAs structures with varying main group elements.

EXPERIMENTAL DATABASE DEVELOPMENT FOR DATA-DRIVEN MATERIALS DESIGN

*Kim G., Gu Q., Jia H., Meschel S., Chen W., Nash P.**

Illinois Institute of Technology, Chicago, United States

**nash@iit.edu*

We will describe the program at IIT to develop experimental thermodynamic data on the enthalpies of formation of intermetallic compounds, including B2 and L2₁ structures. The data are incorporated into a database that can be accessed by computer for data mining and machine learning based materials design. These data are compared and benchmarked with first-principles results in multiple Materials Genome databases. As an example we will discuss the application of machine learning to elucidate a relationship between the properties of B2 binary compounds and L2₁ ternary compounds with the aim of developing rules that can be used to predict the stability of L2₁ ternary compounds.

PRECIPITATION SIMULATION ENABLED BY THERMODYNAMIC AND KINETIC DATABASES

*Chen Q.,*¹ Wu K.,² Jeppsson J.,¹ Engstrom A.¹*

¹TCSAB, Stockholm, Sweden, ²TCSInc, Pittsburgh, United States

**qing@thermocalc.se*

Computational tools, such as Thermo-Calc and Dictra, have been developed for several decades and are now routinely utilized in materials research in both academia and industry. Their success is rooted in their capability to provide indispensable phase equilibrium and phase transformation information for simulating microstructural evolution in commercial multicomponent alloys, which was made possible by the adoption of the CALPHAD methodology where the Gibbs energy or atomic mobility of each phase can be modelled hierarchically from low-order systems to high-order ones, and model parameters can be evaluated by considering both ab-initio and various experimental data. A collection of sets of optimal thermodynamic or atomic mobility model parameters for all phases in binary and ternary systems forms a CALPHAD thermodynamic or kinetic database. Over the years, databases containing up to 35 elements for various alloys, such as steels, light metal alloys, Ni-based superalloys, etc., have been developed. By using Thermo-Calc and Dictra together

with such databases, phase equilibria, driving forces, and diffusivities necessary for simulating diffusion-controlled phase transformation in multicomponent systems can be calculated without resorting to ad hoc approaches that require fitting parameters varying from one alloy to another, and therefore diffusion-controlled microstructural evolution in multicomponent systems can be predicted.

Precipitation gives many alloys their desired strength and toughness. A precipitate microstructure consists of dispersed second phase particles embedded in a solution phase matrix and is a product of diffusion-controlled solid state phase transformation fully governed by system (bulk and interface) thermodynamics and kinetics. With the advance of CALPHAD and widely available databases, computer simulation of the precipitate microstructure in multicomponent alloys is readily feasible on the basis of Langer-Schwartz theory and Kampmann-Wagner numerical (KWN) method. In this talk, we present TC-PRISMA, now fully integrated into Thermo-Calc as the Precipitation Simulation module, that extends the Thermo-Calc and Dictra approach with additional thermophysical property data to simulate the concurrent nucleation, growth, and coarsening of second phase particles. Nucleation and growth rate models implemented in the software will be elaborated. Engineering applications of precipitation modelling and challenges will also be shown and discussed as well.

THERMODYNAMIC ASSESSMENT OF THE Al_2O_3 - MgO - TiO_2 SYSTEM

*Ilatovskaia M.,^{*1,2} Fabrichnaya O.¹*

¹TU-BAF, Freiberg, Germany, ²IMMIT, St. Petersburg, Russia

**mariia.ilatovskaia1@iww.tu-freiberg.de*

The Al_2O_3 - MgO - TiO_2 system is of interest for industrial applications: MgAl_2O_4 -based materials have a good combination of physical and chemical properties such as high refractoriness, high mechanical strength and high resistance to chemical attack, while the addition of Al_2TiO_5 improves thermal shock resistance of spinel. The Al_2O_3 -based ceramics are proposed as filter materials for steel and Al-alloy filtration from MgAl_2O_4 and Al_2O_3 inclusions. Thus, thermodynamic modelling of the Al_2O_3 - MgO - TiO_2 system is important for thermodynamic database development to model interactions in filter material.

To provide an experimental base, Al_2O_3 - MgO - TiO_2 samples were prepared by the co-precipitation routine followed by prolong annealing experiments and then characterized using XRD, SEM/EDX, and DTA. Four isothermal sections of the Al_2O_3 - MgO - TiO_2 system at 1000 – 1464°C were constructed based on obtained results which are mainly consistent with the literature data [1-2]. Formation of continuous solid solutions with spinel, Mg_2TiO_4 - MgAl_2O_4 , and pseudobrookite, MgTi_2O_5 - Al_2TiO_5 , structures at high temperatures was confirmed. The solid-state reaction, $\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{TiO}_2 + \text{Sp s.s.} = \text{Psbk s.s.}$, was observed at about 1160°C for the first time. On the liquidus surface, the eutectic invariant reaction between MgTiO_3 , Psbk s.s. and Sp s.s. was detected at 1602°C. Another invariant reaction of transitional type, $\text{L} + \text{Al}_2\text{O}_3 = \text{Sp s.s.} + \text{Psbk s.s.}$, was observed at 1733°C. Obtained experimental data for the Al_2O_3 - MgO - TiO_2 systems were used to derive its thermodynamic database. The compound energy formalism was applied to describe solid solutions, while to describe oxide liquid the two-sublattice partially ionic liquid model was implemented. A special attention was paid to reproducing the degree of inversion when the spinel phase changes from inverse Mg_2TiO_4 to normal MgAl_2O_4 and in the pseudobrookite phase from normal MgTi_2O_5 to completely disordered Al_2TiO_5 .

1. Boden, P., and Glasser, F.P., Phase relationships in the system MgO - Al_2O_3 - TiO_2 , Trans. J. Br. Ceram. Soc., 72(5) (1973): 215-220.

2. Bereznoi, A.S., and Gul'ko, N.V., Investigation of the MgO-Al₂O₃-TiO₂ system, Ukr. Khim. Zh. (Russ. Ed.) 21(2) (1955): 158-166.

EXPERIMENTAL INVESTIGATION AND THERMODYNAMIC MODELING OF THE ZrO₂-TiO₂-MgO SYSTEM

Saenko I., Ilatovskaia M., Fabrichnaya O.*

TU-BAF, Freiberg, Germany

**Ivan.Saenko@iww.tu-freiberg.de*

Composite materials based on high-alloyed steels reinforced by zirconia ceramics are of particular interest due to the wide range of their possible technological applications especially in automotive production. An example of these composite materials is the high-alloyed austenitic stainless TRIP-steel (Transformation Induced Plasticity) reinforced by MgO-stabilized zirconia (Mg-PSZ). That composite material exhibits extraordinary high values of specific energy absorption in compression [1]. The Mg-PSZ shows a martensitic transformation of tetragonal to monoclinic phase during deformation resulting in additional strength increase [2]. Minor addition of TiO₂ improves mechanical properties of the composite due to increase of bonding between the zirconia particles and the TRIP steel [3]. Additionally, materials based on the ZrO₂-TiO₂-MgO system are of particular interest due to their dielectric properties [4]. Therefore, the aims of this work are experimental study of phase relations and thermodynamic database development for the ZrO₂-TiO₂-MgO system.

Preliminary phase diagram of the ZrO₂-TiO₂-MgO system was presented by Coughanour et al. [4] in 1955 and new experimental study was necessary. Samples were prepared using the co-precipitation method. Phase assemblages stable after long heat treatment were identified by X-ray powder diffraction. Temperatures of invariant reactions were determined by differential thermal analysis. Sample microstructures were investigated using scanning electron microscopy combined with dispersive X-ray spectrometry.

Based on the obtained experimental data, isothermal sections of the ZrO₂-TiO₂-MgO system at temperatures 1530, 1680 and 1880 K were established. Wide extension of stability of Zr_{1-x}Mg_xO_{2-x} phase with fluorite structure into ternary system was found. Very limited solubility of MgO was found in beta (Zr_xTi_{1-x})₂O₄ and tetragonal (Zr_{1-x}Ti_x)O₂ phase, while more substantial solubility of ZrO₂ was found in the intermediate compounds of the TiO₂-MgO system (Mg₂TiO₄, MgTiO₃ and MgTi₂O₅). Low temperature ternary compound similar to δ -phase Y₄Zr₃O₁₂ was revealed at 1530 K. Differential thermal analysis indicated that this phase was stable up to 1664 K. Temperatures and compositions of three eutectic reactions were determined. Thermodynamic parameters of the ZrO₂-TiO₂-MgO system were optimized using CALPHAD approach based on the obtained experimental results.

-
1. Biermann, H., et al., Adv.Eng.Mater., Vol.11 (2009):1000-1006
 2. Martin, S., et al., Steel Research int., Vol.82 (2011):1133-1140
 3. Weigelt C., et al., Ceram. Int., Vol.41 (2015):2328-2335
 4. Coughanour L.W., et al., J. Res. Nat. Bur. Stand., Vol.54 (1955):191-199

DATA-MINING APPROACHES TO FIND NEW FUNCTIONAL MATERIALS

Eriksson O.

¹UU, Uppsala, Sweden, ²ÖU, Örebro, Sweden

olle.eriksson@physics.uu.se

Progress in materials science is with few exceptions primarily driven by experimental exploration that is followed by theoretical work. Unfortunately, theory seldom leads the way forward in identifying or predicting materials with desired functionality, albeit a few exceptions to this rule exists. For instance, the observed tunneling magneto resistance in Fe/MgO/Fe sandwich structures, where a few layers of insulating MgO is inserted between thin films of Fe, was an experimental realization that followed theoretical predictions, based on calculations of the electronic structure. Graphene, the celebrated two-dimensional material, where many of the observed exotic properties are the result of a linear dispersion of the electron states around the Fermi level, is another example where theory of the exotic electronic structure preceded experimental measurements.

Unfortunately, the list of examples where theory actually makes predictions of new materials or new properties, is very short. New tools and new ways to work are clearly needed to improve the rate with which new materials may be identified, and theory may play a crucial role. A method that quickly is being established, involve data-mining algorithms and advanced, high-throughput electronic structure theory. The fundamental ideas behind this method [2] are described in this talk, and examples will be given of how it has so far been found to perform.

-
1. RCTP-15 web site, <http://www.ihed.ras.ru/rctp2018/en/contribution>
 2. O.Eriksson, Nature Nanotechnology **13**, 180 (2018)

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ЦИРКОНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Гордеев И.С.

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

gordeevilu@gmail.com

Цирконий является важным конструкционным материалом, однако, его фазовая диаграмма полностью не изучена. Метод молекулярной динамики позволяет рассчитать кривые фазовых переходов различными методами. Целью данной работы является сопоставление результатов таких методов как двухфазное и однофазное моделирования, расчет термодинамических потенциалов через плотность фононных состояний для переходов ОЦК-ГПУ и ОЦК-расплав. Расчеты проводятся для двух потенциалов: ЕАМ-потенциала # 2 [1] и ADP-потенциала [2]. Метод двухфазного моделирования основан на наблюдении за движением границы раздела фаз в двухфазной системе. Метод однофазного моделирования основан на экстраполяции зависимости температуры перехода между фазами при различных скоростях нагревания или охлаждения в однофазной системе. Расчет термодинамических потенциалов с помощью плотности фононных состояний основан на вычисления скоростной автокорреляционной функции. Все расчеты проводились в LAMMPS.

-
1. M. I. Mendeleev G. J. Ackland // Philosophical Magazine Letters, Vol. 87, No. 5, May 2007, 349–359.
 2. D.E. Smirnova, S.V. Starikov // Computational Materials Science 129 (2017) 259–272.

РАЗРАБОТКА АТОМИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ПРОГНОЗА СВОЙСТВ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ Zr-Nb

Смирнова Д.Е.,^{1,2} Стариков С.В.,^{*1,2} Гордеев И.С.¹

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²ICAMS, Bochum, Германия

*d.e.smirnov@gmail.com

Цирконий входит в состав многих сплавов, которые нашли применение в существенно разных областях: от атомной техники до медицинских материалов. В качестве примеров можно упомянуть коррозионно-стойкие сплавы Zr-2,5% Nb и ряд медицинских сплавов для протезирования на базе Ti-Nb-Zr. Характеристики заданного сплава обуславливаются свойствами фазы циркония, на которой основан сплав. Поэтому определение условий стабильности фаз циркония является важной задачей для дизайна указанных материалов. В то же время, существуют расхождения по вопросам описания фазовых переходов в цирконии. Диапазон вопросов варьируется от неопределенности линии плавления до разногласий в деталях твердофазных фазовых переходов и роли легирующих элементов. В данной работе представлен новый подход к исследованию свойств бинарной системы Zr-Nb. Для решения задачи автора работы сконструировали многочастичный межатомный потенциал [1]. Потенциальные функции были построены по *ab initio* данным, рассчитанным для большого числа эталонных структур. Показано, что разработанная модель с хорошей точностью воспроизводит структуру и свойства всех фаз Nb и Zr, существующих в бинарной системе Zr-Nb. Более того, модель может быть применена для прогнозирования плавления и температур твердофазных переходов α -Zr \leftrightarrow β -Zr. Межатомный потенциал дает возможность для моделирования сплавов Zr-Nb на основе α -Zr и β -Zr. Для иллюстрации этого вывода приведены результаты моделирования сплавов с различным составом: до 7% ниобия в случае сплавов с ГПУ структурой и до 50% ниобия для ОЦК-сплавов. Кроме того, в работе обсуждаются расчеты одноосной деформации, выполненные для атомистических моделей сплавов β -Zr-Nb с различным содержанием ниобия.

1. Smirnova D.E., Starikov S.V. // An interatomic potential for simulation of Zr-Nb system. *Comp. Mater. Sci.* 2017 V. 129. P. 259.

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ ДИСПЕРСНЫЕ ВЫДЕЛЕНИЯ В СПЛАВАХ. МОДЕЛЬНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Горностырев Ю.Н.,^{*1,2} Коржавый П.А.,^{1,3} Горбатов О.И.,^{1,3} Кацнельсон М.И.⁴

¹ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия, ²ИКМ, Екатеринбург, Россия, ³КТН,
Стокгольм, Швеция, ⁴RU, Неймеген, Нидерланды

*yug@imp.uran.ru

Неоднородности наномасштаба типичны для многих металлических сплавов и играют важную роль в их практических применениях [1]. Такое структурное состояние может быть образовано в результате «замораживания» незавершенной стадии фазового превращения или вследствие формирования долгоживущих метастабильных нано-выделений, встроенные в матрицу. Формирование гетерогенного состояния наблюдалось во многих технологически важных сплавах (зоны Гинье-Престона в сплавах Al, атермическая омега-фаза в сплавах на основе Ti и Zr, выделения Co в Cu и др.). Однако механизмы формирования и стабилизации такого состояния до сих пор остаются недостаточно изучены.

Мы представляем обзор проблемы гетерогенных состояний в сплавах, а также обсуждаем типичные примеры их реализации. Показано, что устойчивость таких дисперсных

выделений контролируется конкуренцией между короткодействующими (химическими) и далекодействующими (упругими) вкладами в свободную энергию. Показано, что многочастичные взаимодействия, включающие вклад решеточной релаксации, ответственны за образование метастабильных планарных (GPZ) атомных конфигураций [2], а кинетика их формирования может включать несколько стадий [3]. Обсуждаются возможные механизмы стабилизации наночастиц в матрице сплава, связанные с релаксацией далекодействующих напряжений вследствие потери когерентности [1] или/и сегрегацией легирующих элементов на границе раздела.

-
1. Yu.N. Gornostyrev, and M.I. Katsnelson, Phys. Chem. Chem. Phys., **17**, 27249 (2015).
 2. O.I. Gorbatov, Yu.N. Gornostyrev, P.A. Korzhavyi, Scripta Materialia, **138**, 130 (2017).
 3. A.Yu. Stroeve, O.I. Gorbatov, Yu.N. Gornostyrev, P.A. Korzhavyi, Phys Rev Materials, **2**, 033603 (2018).

ELECTROCHEMICAL SURFACE PHASE DIAGRAMS: SOLVATION EFFECTS AND SELECTIVITY

Todorova M., Yoo S., Neugebauer J.*

MPIE, Duesseldorf, Germany

**m.todorova@mpie.de*

Solid/liquid interfaces are at the heart of many problems of practical importance. Improving the life of battery materials, the efficiency of electro-catalysts or the protection against corrosion requires understanding of the processes occurring at the solid/liquid interface. Central to such an understanding is the identification of the structures forming at the surface of a solid immersed in an aqueous electrolyte. Unfortunately, our knowledge how the electrolyte influences their formation and thermodynamic stability is limited.

Ab initio modelling using density functional theory (DFT) has proven immensely successful in providing atomistic insight into various questions of materials science, but its application to electrochemical problems is challenging, due to the presence of the solvent. Utilising concepts from semiconductor physics has enabled us to overcome some of these obstacles [1], which opens, for example, the path to constructing electrochemical surface Pourbaix diagrams using *ab initio* calculations. These are phase diagrams, which depict the stability of surface structures as a function of the relevant environmental conditions of *pH* and electrode potential *U*. Constructing such an *ab initio* surface Pourbaix diagram for the (0001) surface of ZnO, we study the impact an aqueous electrolyte has on the thermodynamic stability of polar oxide surfaces. We find that solvation effects are highly selective. They have little impact on surfaces with metallic character, but favour the stabilisation of semiconducting surfaces experiencing a high electrostatic penalty in vacuum [2]. This high selectivity has direct consequences for the surface phase diagrams and explains why certain structures are preferentially observed in electrochemical environment.

-
1. M. Todorova and J. Neugebauer, Phys. Rev. Applied **1**, 014001 (2014).
 2. S. Yoo, M. Todorova and J. Neugebauer, Phys. Rev. Lett. **120**, 066101 (2018).

THEORETICAL STUDY OF MAGNETIC PROPERTIES OF THE 1:12 ALLOYS

Vekilova O. Yu., Eriksson O., Herper H.C.*

UU, Uppsala, Sweden

**olga.vekilova@physics.uu.se*

Since the discovery of Nd₂Fe₁₄B, the best permanent magnet to date, magnets containing the combination of rare earth elements and Fe attract high scientific interest. The iron-based compounds are specifically attractive as they have large magnetic moments due to the high concentration of Fe, rather high coercivity and high Curie temperature. One of the best candidates are the 1:12 compounds with the ThMn₁₂-type structure. It has been shown that light rare earths and iron cannot form a stable binary 1:12 compound, so a third element must be added to stabilize the ternary RE(Fe,M)₁₂ phase, where M=Ti, V, Si, Mo and etc. Such substitution results in a significant decrease in the saturation magnetization of the compound because the M atom does not carry a magnetic moment and causes a reduction of the magnetic moments of surrounding Fe atoms. Further, the change in the structure due to the substitution of iron by other elements can influence magnetocrystalline anisotropy and Curie temperature of the alloy. A number of attempts to stabilize the compounds with the decreasing concentration of M element have recently been made. Most of the known 1:12 compounds are stable when they have 10 atoms of Fe and 2 atoms of an impurity in the unit cell (REFe₁₀M₂). An example is SmFe₁₀V₂. However, NiFe₁₁Ti is known to be stable even with one Ti atom per formula unit. Recent experiments show that it is also possible to stabilize the 1:12 phases with reduced concentrations of V or Ti.

In this work the magnetic properties of the 1:12 compounds were studied theoretically from first principles. Starting from the known stable NiFe₁₁Ti, SmFe₁₁Ti and SmFe₁₀V₂ phases we tried to improve the magnetic properties by reducing the content of Ti and V respectively. The phase stabilities of NdFe_{11-x}Ti_x and SmFe_{10-x}V_x were calculated and compared to the available experimental data. This work is supported by the European Research Project NOVAMAG (EU686056) and STandUP for energy (Sweden).

DIFFUSION IN IONIC CONDUCTORS FROM AB INITIO MOLECULAR DYNAMICS

Simak S.I.

LiU, Linköping, Sweden

sergeis@ifm.liu.se

Even if diffusion in ionic conductors could be rather fast, to study it from accurate ab initio equilibrium molecular dynamics (MD) is usually impossible due to prohibitively long simulation times. The use of the nonequilibrium color-diffusion algorithm [1] allows one to substantially speed up the simulations. The algorithm has been implemented in the widely used Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP) and applied to the problem of oxygen diffusion in doped ceria, a promising electrolyte material for intermediate temperature solid oxide fuel cells (IT-SOFCs). The application of the methodology speeds up the simulated oxygen transport by a factor 60 compared with standard equilibrium MD. The calculated conductivity values agree with the available experimental data, and the experimental temperature trend is well reproduced [2, 3]. If time allows we also discuss the finite-temperature lattice dynamics and superionic transition in ceria and show how they can be treated despite all the difficulties [4].

The project has been supported by the Swedish Government Strategic Research Area in Materials Science on Functional Materials at Linköping University (Faculty Grant SFO-Mat-

LiU No. 2009 00971) and the Swedish Research Council (VR) (Project No. 2014-4750).

1. P. C. Aeberhard, S. R. Williams, D. J. Evans, K. Refson, and W. I. David, Phys. Rev. Lett., 108(9), 095901 (2012).
2. J. Klarbring, O. Yu. Vekilova, J. O. Nilsson, N. V. Skorodumova, and S. I. Simak, Sol. St. Ionics 296, 47 (2016).
3. J. O. Nilsson, O. Yu. Vekilova, O. Hellman, J. Klarbring, S. I. Simak, N. V. Skorodumova, Phys. Rev. B 93, 024102 (2016).
4. J. Klarbring, N. V. Skorodumova, and S. I. Simak, Phys. Rev. B 97, 104309 (2018).

МЕХАНИЗМЫ АТОМНОЙ ДИФФУЗИИ В КАРБИДЕ ТИТАНА

Ehteshami H.,¹ *Смирнова Е.А.*,² *Sun W.*,³ *Коржавый П.А.**^{1,2,4}

¹КТН, Стокгольм, Швеция, ²МИСиС, Москва, Россия, ³ORNL, Ок-Ридж, США, ⁴ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

**pavelk@kth.se*

Карбиды и нитриды переходных металлов сочетают свойства характерные для керамик (высокие температура плавления, твердость и коррозионная стойкость) со свойствами характерными для металлов (высокие электро- и теплопроводность), что делает эти соединения подходящими кандидатами для существующих и появляющихся высокотемпературных приложений [1]. Понимание структуры и динамики атомных дефектов в высокотемпературных соединениях очень важно для управления свойствами материалов в процессе их изготовления и применения [2]. В то время, как моновакансионный механизм вполне достаточен для описания самодиффузии в нитридах металлов IV группы [3], количественное понимание механизмов диффузии атомов металла в соответствующих карбидах затруднено по причине получающейся в первопринципных расчетах сильно завышенной энергии образования металлической вакансии [4, 5]. В докладе дается обзор первопринципных исследований точечных дефектов и их кластеров, а также механизмов диффузии, в карбиде титана [4–7]. Особое внимание уделяется механизмам диффузии в TiC задействующим межузельные атомы Ti и их кластеры с углеродными вакансиями и примесными атомами.

-
1. Toth L. E. (ed.) Transition Metal Carbides and Nitrides. Academic Press, New York, 1971.
 2. Андриевский Р. А. // Порошковая металлургия (Киев). Т.50, № 1-2. С. 5.
 3. Gambino D., Sangiovanni D. G., Alling B., Abrikosov I. A. // Phys. Rev. B. 2017. V. 96. Art. No. 104306.
 4. Razumovskiy V. I., Ruban A. V., Odqvist J., Korzhavyi P. A. // Phys. Rev. B. 2013. V. 87. Art. No. 054203.
 5. Razumovskiy V. I., Popov M. N., Ding H., Odqvist J. // Comput. Mater. Sci. 2015. V. 104. P. 147.
 6. Sun W., Ehteshami H., Korzhavyi P. A. // Phys. Rev. B. 2015. V. 91. Art. No. 134111.
 7. Sun W., Ehteshami H., Kent P. R. C., Korzhavyi P. A., to be published.

DEVELOPMENT OF NEW MATERIALS USING AN INTEGRATED APPROACH OF DFT CALCULATIONS, CALPHAD MODELING AND KEY EXPERIMENTS

Pisch A.

SIMaP, Grenoble, France

alexander.pisch@simap.grenoble-inp.fr

ICME (Integrated computational materials engineering) is a modern approach to develop new materials with tailored properties for a given application. Chemical thermodynamics is a cornerstone of this method, because it is always the first step to evaluate if new materials and their synthesis routes are feasible. To perform thermodynamic calculations, the Calphad method is generally employed because it is the only method to allow simulations in higher components systems (3 or more) taking into account complex solids, liquids and the gas phase. Calphad thermodynamic modeling is a phenomenological method, i.e. the underlying Gibbs energy functions for the phases are obtained by least square fitting using available theoretical and experimental data. Therefore, the need for the generation of high quality theoretical and experimental data is obvious. This integrated thermodynamic approach will be illustrated in this contribution on three different examples: the solubility limit of Nb in liquid Al and the consequences for the Al-rich equilibria in the Al-Nb binary system, Mg-Al-carbides as new option for grain refinement in magnesium alloys and the development of novel low CO₂ cements.

The solubility and heat of dissolution of Nb in Al was measured by isothermal drop calorimetry at 1126 K. In addition, the heat capacity of NbAl₃ was measured and calculated as a function of temperature. The obtained results contradict the peritectic nature of the Al-NbAl₃-liquid three phase equilibrium. In the case of Mg-Al-C, ab-initio DFT and phonon calculations were performed and compared to new heat capacity measurements. Based on this new data, a new Calphad modeling of this ternary system was performed and will be discussed. Typical Portland cement is at least a nine component system (CaO-SiO₂-Al₂O₃-Fe₂O₃-MgO-K₂O-Na₂O-SO₃-P₂O₅-TiO₂). Cement clinker, the main component of cements, is obtained by high temperature solid-liquid reaction using natural raw materials. It will be shown how a pragmatic approach to set-up a new multicomponent thermodynamic database using ab-initio calculations and experimental equilibrium data allowed a consistent thermodynamic description of the full clinker system. Based on this database, a simulation model for the clinker burning was set-up and compared to industrially obtained data with excellent agreement. The application of this new model to improve OPC clinker properties will be discussed.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТЕРМОБАРЬЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ, СОДЕРЖАЩИХ РЗЭ

Гавричев К.С., Гуськов В.Н., Никифорова Г.Е.*

ИОНХ РАН, Москва, Россия

**gavrich@igic.ras.ru*

Внимание к изучению свойств термобарьерных материалов (ТВС) объясняется возможностью их применения для существенного улучшения параметров газовых турбин и авиационных двигателей. Требования к таким материалам (высокая температура плавления, отсутствие фазовых переходов, низкая ионная проводимость, совместимость с металлическими частями деталей из суперсплава значительно ограничивают круг веществ, которые могут быть использованы в качестве ТВС материалов.

Были изучены различные РЗЭ-содержащие вещества с высокими температурами плавления (REPO₄, RENbO₄, RE₂Zr₂O₇, RETaO₄; RE=Sc, Y, Ln) в области температур от 2 К

до 1300 К. Термические свойства были изучены в интервале температур от 350 до 1800 К с использованием метода дифференциальной сканирующей калориметрии (DSC). Для изучения термодинамических свойств были использованы различные калориметрические методы (релаксационная (semi-adiabatic) калориметрия от 2 до 100 К), адиабатическая (от 6 до 340 К), DSC (от 350 до 1300 К), и дроп-калориметрия (калориметрия сброса) (от 400 до 1500 К)).

Соединения лантаноидов претерпевают различные фазовые переходы, вызванные особенностями электронной структуры на f-уровне. Эти переходы, как правило, не связаны с изменением кристаллической структуры, но влияют на теплоемкость и термодинамические функции (ΔS , $\Delta H(T) - H(0)$ и $\Delta G(T)$).

Комплексное использование различных калориметрических методов позволяет увеличить достоверность получаемых величин особенно в области высоких температур, поскольку DSC-измерения могут характеризоваться значительными систематическими ошибками.

Использование различных вариантов совместного описания данных низко- и высокотемпературной калориметрии позволило получить согласованные данные.

Данное исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект 18-13-00025).

ТРЕТЬЕ ПОКОЛЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ SiO_2

Баженова И. А.,*¹ *Кондратьев А. В.*,¹ *Хван А. В.*,¹ *Динсдейл А. Т.*^{2,3}

¹*МИСиС, Москва, Россия*, ²*Hampton Thermodynamics Ltd, Hampton, Великобритания*,

³*BCAST, Uxbridge, Великобритания*

**irabajenova00@mail.ru*

Современное описание термодинамических свойств элементов и веществ требует создания моделей, которые будут иметь физический смысл и при этом достаточно точно описывать свойства веществ от 0 К до температур выше плавления.

В работе для описания термодинамических свойств диоксида кремния были использованы расширенная модель Эйнштейна [1] и модель жидкости двух состояний [2]. Расширенная модель Эйнштейна, учитывающая вклад гармонических вибраций в теплоемкость, была использована для термодинамического описания α - и β -кварца и α - и β -кристобалита. Для описания диоксида кремния в стеклообразном и жидком состоянии (приняты в расчет в виде одной фазы) была использована модель двух состояний, согласно которой жидкость состоит из атомов двух типов. На основании критического обзора экспериментальных данных была проведена оптимизация параметров модели в программе ThermoCalc [3]. В более ранних работах модель жидкости двух состояний применялась для описания термодинамических свойств чистых элементов (в основном, металлов). Однако, данные по теплоемкости в переохлажденном состоянии для чистых металлов крайне ограничены и, как следствие, это осложняет или делает невозможным сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными. Тестирование описательного потенциала модели для оксидных расплавов (например, чистого SiO_2), для которых существует большое количество экспериментальных данных по теплоемкости в аморфном состоянии и состоянии переохлажденной жидкости еще не проводилось и поэтому представляло особый интерес.

Модели, полученные в данной работе, хорошо описывают данные по низкотемпературной и высокотемпературной теплоемкости фаз, а также хорошо соотносятся с данными по S_{298} и инкременту энтальпии.

1. Chase M., Ansara I., Dinsdale A., Eriksson G., Grimvall G., Hoglund H., Yokokawa H. // *Calphad* 19(4) (1995) 437-447.
2. Agren // J., *J. Phys. Chem. Liq.* 1988;18:123-139.
3. J.-O. Andersson, T. Helander, L. Hoglund, P. Shi, and B.Sundman // *Calphad* 26, (2002), 273–312.

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СПЛАВЕ U–Mo ПРИ ТЕРМИЧЕСКИХ И РАДИАЦИОННЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Колотова Л.Н., Стариков С.В.*

ОИВТ РАН, Москва, Россия

**lada.kolotova@gmail.com*

Сплав U-Mo является одним из кандидатов на роль перспективного ядерного топлива для реакторов нового поколения на быстрых нейтронах. Несмотря на большой объем экспериментальных и теоретических исследований по фазовой диаграмме, структуре и кинетике фазовых переходов в системе U-Mo, интерес к исследованию свойств металлических топлив и оптимизации дизайна топливных структур (например, дисперсное топливо) сохраняется.

В работе показано, что при небольших концентрациях молибдена более стабильной является объемноцентрированная тетрагональная (ОЦТ) γ^0 фаза. Такая структура наблюдается в расчетах и для чистого урана. Показано, что структура высокотемпературной γ -фазы является квази-кубической со смещением центрального атома, но эти смещения различны в различных элементарных ячейках. Поэтому γ -фаза начинает обладает кубической симметрией только на расстояниях свыше нескольких межатомных расстояний или при усреднении по времени. В работе рассмотрены различные механизмы структурных превращений при облучении сплава уран-молибден. Показано, что не только плавление и последующая кристаллизация системы, но и другие фазовые переходы 1 рода могут быть причиной образования дефектов при облучении. В частности, фазовый переход между двумя кристаллическими фазами сплава уран-молибден ($\alpha \rightarrow \gamma$) в процессе облучения быстрыми тяжелыми ионами (БТИ) приводит к образованию точечных дефектов после стадии релаксации обратного перехода. Более того, результаты моделирования показывают, что генерация точечных дефектов может происходить без какого-либо фазового перехода. Также рассчитаны пороговые энерговыклады БТИ, облучение которыми приводит к формированию дефектов в различных условиях.

EMPLOYING AB INITIO THERMODYNAMICS TO DESIGN STRUCTURALLY COMPLEX MATERIALS

Neugebauer J., Zhu L., Körmann F., Grabowski B., Hickel T.*

MPIE, Düsseldorf, Germany

**neugebauer@mpie.de*

Ab initio approaches provide in principle perfect tools for the design of new materials, but face serious challenges: Free energies which are the key quantity to compute thermodynamic phase diagrams, deformation paths or defect formation energies require formalisms that accurately capture all relevant entropic contributions due to electronic, vibrational or magnetic excitations, as well as their coupling such as phonon-phonon, magnon-phonon interactions or spin-quantization. Calculating these contributions is conceptionally challenging and computationally expensive. The talk gives an overview over the developed approaches and

their ability to accurately describe thermodynamic quantities and phase transitions. Based on these studies the performance of popular DFT functionals in describing these quantities will be discussed. To demonstrate the practical applicability of these approaches examples will be given showing how they helped discovering a new class of light-weight metallic alloys with improved mechanical properties.

EFFECTIVE BOSONIC MODELS FOR COLLECTIVE ELECTRONIC FLUCTUATIONS

*Stepanov E.A.,*¹ Lichtenstein A.I.,² Katsnelson M.I.¹*

¹Radboud University, Nijmegen, Netherlands, ²UHH, Hamburg, Germany

**e.stepanov@science.ru.nl*

Collective electronic fluctuations in correlated materials give rise to various important phenomena, such as charge ordering, superconductivity, Mott insulating and magnetic phases, and plasmon and magnon modes. Description of these correlation effects requires a significant effort, since they almost entirely rely on strong local and nonlocal electron-electron interactions. Some collective phenomena, such as magnetism, can be sufficiently described by simple Heisenberg-like models that are formulated in terms of bosonic variables. This fact suggests that other many-body excitations can also be described by simple bosonic models in the spirit of Heisenberg theory. Here we derive an effective bosonic action for charge and spin degrees of freedom for the extended Hubbard model. Also, we define a physical regime where the obtained model action reduces to a classical Hamiltonian of an effective Ising and Heisenberg models for charge and spin variables, respectively. The derived formalism is reminiscent of Anderson's idea of the effective exchange interaction and takes into account nonlocal correlation effects. The results for the exchange interaction and susceptibility are expressed in terms of single-particle quantities, which can be obtained efficiently in realistic calculations of multiband systems.

ПОДХОД ФЛУКТУИРУЮЩЕГО БЛИЖНЕГО ПОЛЯ ДЛЯ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

Рубцов А.

Российский Квантовый Центр, Москва, Россия

ar@rqc.ru

Количественное описание развитых коллективных флуктуаций в коррелированных средах остается одной из основных задач теоретической и вычислительной физики. По существу, нелокальный характер коллективных мод делает схемы среднего поля неприменимыми. Наиболее современные схемы, такие как метод дуальных бозонов, построенный на основе динамической средней теории поля, требуют огромных численных усилий, и даже их точность может быть поставлена под сомнение. В нашем выступлении мы расскажем о новом подходе к проблеме сильных коллективных колебаний. В отличие от парадигмы среднего поля, где эффективное поле является константой, определяемой самосогласованным образом, мы выполняем интегрирование по значениям эффективного поля. Среднеполевое решение соответствует седловой точке в этом интегрировании, тогда как численное интегрирование по всем значениям эффективного поля позволяет учитывать его флуктуации. Результаты применения метода для небольших классических кластеров Изинга и Гейзенберга, а также для полузаполненной модели Хаббарда, показывают принципиальное улучшение среднеполевых результатов.

**THEORETICAL PHYSICS APPROACHES FOR UNDERSTANDING OF
MATERIALS: LESSONS FROM Yu. Kh. VEKILOV**

Abrikosov I.A.

¹*Linköping University, Linköping, Sweden,* ²*NUST "MISIS", Moscow, Russia*

igor.abrikosov@liu.se

Electronic structure theory is now recognized as highly useful tool for prediction of materials properties, for their understanding, as well as for determination of parameters employed in higher-level modeling. In this talk, novel methodological solutions and exciting applications, which have been inspired by my interactions with Yuri Vekilov will be presented. In particular, development of theoretical tools for simulations of chemical disorder and studies of matter at extreme conditions will be discussed.

**УСТАНОВЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ И КОМПОЗИЦИОННЫХ ГРАНИЦ
ТВЕРДОГО РАСТВОРА В СИСТЕМЕ Fe-Ni-Co-(Cu,Cr)**

Синёва С.И.,*^{1,2} Старых Р.В.,^{1,2} Васильева А.А.,³ Бодуэн А.Я.³

¹*СПбГПУ, Санкт-Петербург, Россия,* ²*ООО "Институт*

Гипроникель Санкт-Петербург, Россия, ³*Санкт-Петербургский Горный Университет,
Санкт-Петербург, Россия*

**svetlana.sinyova@gmail.com*

Исследование посвящено установлению температурных и композиционных границ твердых растворов, существующих в пятикомпонентной системе Fe-Ni-Co-(Cu, Cr). Установлено, что сплавы, синтезированные на основе составов этой системы, представляют собой класс материалов, характеризующихся высокой энтропией смешения. Авторы настоящей работы подошли к проблеме синтеза и анализа свойств высокоэнтропийных сплавов с термодинамической точки зрения, опираясь на собственный опыт в экспериментальном построении диаграмм фазовых равновесий многокомпонентных металлических систем [1, 2].

В рамках первого этапа работы построены проекции поверхности ликвидуса и солидуса четырехкомпонентной системы Fe-Ni-Co-Cu, определены границы области твердофазного расслаивания, направление конод в пределах этой области. Таким образом авторы работы определили границы существования четырехкомпонентного твердого раствора, в пределах которого могут быть синтезированы ВЭСы.

Следующим этапом работы стало установление композиционных и температурных границ твердого раствора в объеме пятикомпонентной системы Fe-Ni-Co-(Cu,Cr). Изучено влияние добавок меди и хрома на строение, фазовый состав и структуру синтезируемых сплавов. Полученная информация может быть использована специалистами в области материаловедения в качестве базы для синтеза и разработки высокоэнтропийных сплавов.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 16-03-00987 и 17-08-00875 А.

-
1. Platovskaya M.O., Starykh R.V., Sinyova S.I. Liquidus and Solidus Surfaces in the Quaternary Fe-Cu-Co-S System. Part II: The Ternary Fe-Cu-Co System // Metallurgical and Materials Transactions B, vol. 46B, 2015, pp. 243-249.
 2. Starykh R.V., Sineva S.I. Study of the liquidus and solidus surfaces of the quaternary Fe-Ni-Cu-S system: V. Refinement and addition of the data on the ternary Fe-Ni-S and Fe-Ni-Cu phase diagrams // Russian metallurgy (Metally). 2012. Volume. 2012. № 3. pp. 189-194.

OPTIMIZATION OF THE CELL UPTAKE OF GADOLINIUM OXIDE NANOPARTICLES BY CAPPING WITH SORBITOL FOR CELL TRACKING IN MRI

Abrikosova N.A.,^{*1,2} *Brommesson C.*,² *Larsson E.*,² *Eriksson P.*,² *Zhangjun H.*,² *Uvdal K.*²

¹*NUST "MISIS", Moscow, Russia,* ²*LiU, Linkoping, Sweden*

**natabrikos@gmail.com*

Design of novel nanoparticles with antioxidant capabilities for MRI contrast enhancement is an active field of research [1]. In the optimization of the cell uptake of contrast agent for cell tracking in MRI, it is important to make compromises between the optimal contrast in MRI and metabolic cell activity. In this work, we investigated if the Sorbitol aids the uptake of Gd₂O₃ nanoparticles (GdNP) by the cells. In order to test this hypothesis, GdNP were both capped to and immersed in Sorbitol. Micro Magnetic Resonance Imaging was used to investigate the contrast enhancement and the uptake of the MRI contrast agents by mouse alveolar macrophages. The samples were scanned with a 9.4 Tesla (400 MHz) micro MRI scanner, with a vertical bore high-resolution superconducting magnet (Japan Superconductor Technology, Inc., Kobe, Japan). The immortalized mouse alveolar cell line MH-S (1x10⁶ cells/ml) were incubated with a GdNP and GdNP were both capped to and immersed in Sorbitol.

Longitudinal relaxation rates and the corresponding calculated regression slopes for filtered DEG-Gd₂O₃ nanoparticle samples (GdNP) and GdNP, both capped to and immersed in Sorbitol were measured experimentally. Chemiluminescence recordings of the reactive oxygen species (ROS) production from neutrophil granulocytes (2x10⁶ cells/ml) after an exposure the NP was carried out. Effect of addition of capping or immersion of Sorbitol to GdNPs to change of the T₁-contrast in MRI has been investigated.

The cell optimization strategies presented in this work may be of importance to several fields aiming at imaging inflammatory diseases, based on the utilization of contrast agent-loaded macrophages.

-
1. P. Eriksson, A. A. Tal, A. Skallberg, C. Brommesson, Z. Hu, R. D. Boyd, W. Olovsson, N. Fairley, I. A. Abrikosov, X. Zhang and K. Uvdal, Cerium oxide nanoparticles with antioxidant capabilities and gadolinium integration for MRI contrast enhancement, *Sci. Rep.* 8, 6999 (2018).

ELASTIC CONSTANTS FOR ALLOYS WITH MECHANICAL INSTABILITY: AB INITIO INVESTIGATION OF BCC Ti

Skripnyak N. V.,^{*1} *Ponomareva A. V.*,² *Belov M. P.*,² *Abrikosov I. A.*¹

¹*LiU, Linkoping, Sweden,* ²*MISIS, Moscow, Russia*

**natali.skrp@mail.ru*

The influence of the amount content of V on the mechanical phases stability of body-centered cubic (bcc) based Ti-V alloys was studied. The elastic properties of the binary system of bcc Ti-V alloys were investigated using the non-empirical method of pseudopotentials and the method of exact MT orbitals in the entire concentration range of V. Disorder substitution was modeled using a special quasi-random structure (SQS) technique and in the coherent potential approximation (CPA). The concentration V dependence of the elastic constants of the single crystal $C_{\alpha\beta}$, obtained by calculating the total energy for the corresponding deformations, and also family of material characteristics E, B, G, P_c, k, v for the TiV system were introduced and discussed. In the case Ti-V alloys, a comparative analysis of efficiency of the PAW and EMTO methods to obtain data of the elastic properties of Ti-V alloys from the first-principle modeling

over a wide range of the concentration V was presented. It was found that Ti-rich TiV alloys are mechanically unstable in the bcc phase, but at higher concentration V in the system the mechanical stability is increased. The efficiency of using different calculation methods in the study of the elastic properties of disordered alloys are discussed.

THE IMPORTANCE OF THE LATTICE DYNAMIC IN THE MAGNETIC PHASE TRANSITION IN FeRh

*Belov M.P.,*¹ Syzdykova A.B.,¹ Ponomareva A.V.,¹ Smirnova E.A.,¹ Abrikosov I.A.^{1,2}*

¹*МИСиС, Москва, Россия, ²LiU, Линчёпинг, Швеция*

**makspalych@gmail.com*

FeRh undergoes an unusual antiferromagnetic-to-ferromagnetic (AFM-FM) transition just above room temperature. This magnetic transition was discovered for the first time in the late 1930s [1] but the origin of this transition is still a source of active debate. There are basic questions about what drives this transition, and usually the driving force is discussed in terms of magnetic, lattice and electronic entropy differences between the phases. In this work we have carried out calculations in the framework of Temperature Dependent Effective Potential method (TDEP) [2] based on molecular dynamic simulations at different temperatures and obtained full phonon spectra and corresponding lattice entropies of AFM and FM FeRh at different temperatures. In this way we have demonstrated strong temperature dependence of phonon spectra for both phases and consequently the importance of temperature on lattice entropy difference which calculated value is 16 J/kg/K at 350 K.

1. M. Fallot, Ann. Phys. Serie 11 18, 291 (1938).

2. O. Hellman, I.A. Abrikosov, S.I. Simak, Phys. Rev. B 84, 180301 (2011).

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ РАСТВОРЕНИЯ ПРИМЕСИ УГЛЕРОДА В ПАРАМАГНИТНЫХ Fe-Mn СПЛАВАХ

Пономарева А.В., Мухамедов Б.О., Абрикосов И.А.*

МИСиС, Москва, Россия

**alena.ponomareva@yahoo.com*

В рамках теории функционала электронной плотности (PAW-VASP) выполнен расчет энтальпии растворения примеси углерода в гцк парамагнитных Fe-Mn сплавах. Для расчета использована предложенная нами ранее схема, которая позволяет учитывать тепловые магнитные флуктуации в парамагнитной матрице с точечными дефектами, адаптированная для материалов не только с магнитным, но и атомным беспорядком. Показано, что в сплаве, содержащем марганец, энергия растворения углерода становится ниже относительно растворения в чистом парамагнитном гамма-железе. Уменьшение энергии растворения углерода в сплавах с Mn, полученное теоретически, качественно согласуется с экспериментом. В работе проведен анализ возможных факторов, приводящих к увеличению растворимости углерода в сплавах, содержащих марганец.

DATA DRIVEN DESIGN OF AL ALLOYS

Смирнова Е.А., Мосягин И.Ю., Воробьев Д.А.*

МИСиС, Москва, Россия

**ekaterina.smirnova@misis.ru*

Modern High-throughput methods make it possible to obtain large volumes of data. This “Big Data” approach allows not only to find trends and dependencies, but also opens up fundamentally new methods of research.

Today less than 200 000 materials are known, but only for a few of these “known” materials basic properties have been studied, and in fact there is an infinite number of compounds that need further research.

Therefore it is likely that new materials with excellent and still unknown properties exist that could help to solve fundamental problems in energy, transportation, security, information and health.

One of the most widely studied and practically useful problems is the creation of new aluminum alloys. Therefore binary aluminum alloys with 1% impurity concentration were selected for our High-throughput analysis. To do this we have developed a comprehensive automated system for physical properties computation. The software handles creation of configuration files, executes calculations, processes and visualises the results.

We had reviewed binary aluminum alloys with 63 alloying components. For each alloy we built its equation of state, determined the lattice parameters and the bulk modulus, computed the elastic constants, the Young’s modulus and the shear modulus. Finally we had compared these results with the available experimental data.

АВТОРСКИЙ ИНДЕКС

- Abdulagatov I., 64
Abrikosov I.A., 189–191
Abrikosova N.A., 190
Belonoshko A. B., 19
Belov M.P., 190, 191
Brommesson C., 190
Chen Q., 177
Chen W., 177
Colinet C., 176
Ding L., 55
Efimov S., 105
Ehteshami H., 184
Engstrom A., 177
Eriksson O., 180, 183
Eriksson P., 190
Fabrichnaya O., 178, 179
Grabowski B., 187
Gu Q., 177
Guluzade A., 64
Hassel E., 64
Herper H.C., 183
Hickel T., 187
Ilatovskaia M., 178, 179
Jeppsson J., 177
Jia H., 177
Körmann F., 187
Katsnelson M.I., 188
Kim G., 177
Krasik Ya.E., 105
Larsson E., 190
Lichtenstein A.I., 188
Meschel S., 177
Nash P., 177
Neugebauer J., 182, 187
Pisch A., 185
Ponomareva A.V., 190, 191
Richter K.W., 176
Rososhek A., 105
Saenko I., 179
Safarov J., 64
Simak S.I., 183
Skripnyak N.V., 190
Smirnova E.A., 191
Stepanov E.A., 188
Sun W., 184
Syzdykova A.B., 191
Tedenac J.P., 176
Tewari S., 105
Todorova M., 182
Uvdal K., 190
Vekilova O.Yu., 183
Wu K., 177
Yanuka D., 105
Yoo S., 182
Zhang Q., 55
Zhang Z.C., 55
Zhangjun H., 190
Zhu L., 187
Абдулагатов И.М., 37, 99, 117, 174
Абдулагатова З.З., 99
Абдуллаев Р.Н., 17
Абрикосов И.А., 77, 85, 123, 191
Агажанов А.Ш., 17
Адужалилзода Ф., 59
Аетов А. У., 81
Аксёнов А.А., 159
Александров И.С., 19
Алексеев С.Г., 152
Аливердиев А. А., 27
Алиханян А.С., 74
Алчагиров Б.Б., 69, 72, 116, 117
Аляев В.А., 174
Амиров Р.Х., 160
Андбаева В.Н., 20
Андрусова Н.Н., 82
Анищенко Ю.В., 172
Антонов В.А., 50, 56
Апфельбаум Е.М., 106
Апфельбаум М.С., 145
Аристова Н.М., 71, 151
Артамонов А.В., 134
Ахмедов Э. Н., 27
Ахмедов Э.Н., 121
Ахметзянов Т.Р., 40
Ахтямов Э.Р., 104
Бабич А.Ю., 61
Баженова И.А., 186
Базаев А.Р., 36, 37, 100, 163
Базаев Э.А., 36, 37, 163
Байдаков В.Г., 20
Бакмаев А.Г., 99
Барбин Н.М., 152
Баринов А.А., 124, 144
Батрышев Д.Г., 129

- Батырова Р.Г., 117
Бгашева Т.В., 91
Безверхий П.П., 25
Безгомонова Е.И., 45
Бейбалаев В. Д., 27
Беликов Р.С., 49
Белов Г.В., 21, 71, 151
Белов М.П., 77
Белоусов О.К., 133
Бельтюков А.Л., 47, 61
Белявский А.Е., 50
Белявский Е.А., 56
Беляев Г.Е., 136
Беляков М.Ю., 30
Билалов Т.Р., 28
Благоднравов Л.А., 141
Богатищева Н.С., 167
Богатырев А.Ф., 53
Богданов А.В., 167
Богданов Е.Н., 106
Бодуэн А.Я., 189
Божко С.И., 123
Борейшо А.С., 160
Борисенко Д.И., 65
Борщев Н.О., 50, 56
Брыкин М.В., 89
Булейко В.М., 162
Бухмиров В.В., 137
Быков В.А., 98
Вальяно Г.Е., 91
Варламова Н.И., 165
Васильев Д.Н., 160
Васильева А.А., 189
Василёв В.А., 81
Васин А.А., 95
Вассерман А.А., 45
Верба О.И., 60
Вервейко В.Н., 65
Вервейко М.В., 65
Вервикишко Д.Е., 127
Вервикишко П.С., 88, 91
Веснин В.Р., 125
Виноградов А.В., 66, 171
Винцаревич А.В., 62
Власкин М.С., 136, 150
Волосников Д.В., 49
Волс Б., 123
Вольф Т.А., 83
Воробьев Д.А., 192
Воронов В.П., 39
Воротыло С.А., 75
Вязовкин И.В., 83
Габдуллин М.Т., 40, 122, 129
Габитов И.Р., 40, 47, 174
Гавричев К.С., 185
Гаджиев М.Х., 99, 145
Гаджимагомедов С.Х., 99
Галимова А.Т., 41
Галкин В.Н., 45
Галкин Д.А., 54
Гаськов А.К., 137
Гатин Р.С., 41
Герасимов А.А., 19
Герк С.И., 145
Глушнева А.В., 160
Гольшев А.А., 58, 108
Горбатов В. И., 130
Горбатов В.И., 104
Горбатов О.И., 181
Гордеев И.С., 180, 181
Горностырев Ю.Н., 181
Горохов Л.Н., 115
Гранченко П.П., 27
Грибченкова Н.А., 74
Григоренко А.В., 136
Григорьев Б.А., 19, 162
Григорьев Е.Б., 167
Грязнов В.К., 108
Гумеров Ф.М., 28, 38, 40, 169, 174
Гуськов В.Н., 185
Давлатов Р.Дж., 139
Давыдов А.Г., 39, 46
Дадашев Р.Х., 69
Данияров Т.Т., 122
Демиров Н.А., 99
Дешабо В.А., 170
Джаппаров Т.А-Г., 100
Джумагулова К.Н., 109
Дзугурова Л.Х., 78
Дивин А.Г., 132
Диденко В.И., 156
Динсдейл А.Т., 186
Директор Л.Б., 165
Дмитриев А.С., 23
Долженко А.В., 127
Долуденко А.Н., 145
Дороватовский А.В., 142
Доронин Я.И., 81
Досболаев М.К., 122, 129
Дружинина А.И., 80

- Дударев В.А., 113, 114
 Дунаев А.М., 87, 96
 Дьячков С.А., 21
 Евдокимов С.А., 95
 Егоров Г.И., 67
 Ежов В.М., 165
 Елецкий И.А., 58
 Емельянов А.Н., 33
 Еркимбаев А.О., 113
 Ермишкин В.А., 132, 133
 Ефимов А.В., 158
 Ефремов В.П., 119
 Жаворонок Е.С., 82, 126, 128
 Жанимова Д.А., 78
 Жерноклетов М.В., 106
 Жлуктов С.В., 159
 Жук А.З., 136, 150
 Жуков С.А., 164
 Жумадилов Р.Е., 129
 Жунисбеков А.Т., 129
 Зайнуллина Э.Р., 56
 Зайцев Н.Г., 96, 134
 Закатилова Е.И., 119
 Закирьянов Д.О., 84
 Заринов З. И., 81, 169
 Заринов З.И., 38, 47, 172, 174
 Захаров С.А., 147
 Зеодинов М.Г., 140
 Зицерман В.Ю., 69, 113
 Знаменский В.Е., 33, 112
 Ибавов Н.В., 173, 175
 Иванов П.П., 150
 Иванова Д.Д., 130
 Ивлиев А. Д., 91, 130
 Ивлиев А.Д., 134
 Игольников А.А., 168
 Ильина М.А., 164, 165
 Ильичев М.В., 136
 Иногамов Н.А., 150
 Ионов А.М., 123
 Иосилевский И.Л., 17, 31, 36, 108
 Исакаев М.-Э.Х., 99
 Исанова М.К., 110
 Исмагамбетова Т.Н., 40
 Исхаков М.Э., 51
 Каверин А.М., 20
 Кавыршин Д.И., 110, 158
 Казаков А.И., 165
 Калажиков З.Х., 78, 120
 Калажиков Х.Х., 74, 78, 120
 Калинин А.Г., 143
 Каллаев С.Н., 99
 Каплун А.Б., 25
 Капильный А.Г., 34
 Капустин Д.И., 136
 Карамурзов Б.С., 78
 Кацнельсон М.И., 181
 Качалов В.В., 101, 141
 Кашапов Л.Н., 159
 Кашапов Н.Ф., 159
 Кашапов Р.Н., 159
 Кедик С.А., 82
 Киселева Н.Н., 113, 114
 Кияченко Ю.Ф., 170
 Кобелев М.А., 79, 84
 Кобзев Г.А., 113
 Коверда В.П., 66, 171
 Ковтун Д.М., 115
 Коданова С.К., 110
 Козлов Г.А., 106
 Козловский Ю.М., 17
 Коков З.А., 116
 Колотова Л.Н., 187
 Комаров П.С., 105, 138
 Кондратьев А.В., 186
 Кондратьев А.М., 34, 92
 Кондратюк Н.Д., 48
 Коновалов П.А., 136
 Коныхов С.А., 93
 Корепанов А.Ю., 61
 Коржавый П.А., 181, 184
 Коробенко В.Н., 107
 Коротков П.К., 116
 Коротковский В.И., 73
 Коршунов И.Г., 104
 Косакович Е.О., 128
 Косинов А.В., 113
 Косов В.И., 170
 Косова Д.А., 80
 Косова Д.А., 83
 Костановская М.Е., 75, 140
 Костановский А.В., 75, 140, 148
 Котов А.Н., 163
 Котова Е.С., 58
 Кочанова С.А., 127
 Кочуров Д.С., 58
 Куанышев В.Т., 154
 Кудин Л.С., 87, 96
 Кудрявцев Е.М., 102, 132
 Кудрявцева И.В., 31, 42, 44

- Кузнецов К.И., 27, 65, 131
Кулаков А.А., 85
Куликов В.Д., 30
Куликова Т.В., 98
Кулямина Е.Ю., 69
Кунаков С.К., 62
Куриченко А. А., 130
Куриченко А.А., 104
Курьяков В.Н., 130
Кутузов Д.С., 110
Кучеренко М.А., 53
Кучина Ю.А., 166
Кясова О.Х., 69, 117
Ладьянов В.И., 47, 61
Лаптев Ю.А., 56, 61, 62
Лебедев А.В., 103
Левашов П.Р., 21, 22, 97
Легонькова О.А., 82
Лепешкин А.Р., 55
Лесев В.Н., 69
Липатова И.А., 136
Локтионов Е.Ю., 172
Лукьянов К.В., 163
Лю Б., 124
Любимова Д.А., 132
Ляховицкий М.М., 102
Магомедов М.Н., 119
Магомедов Р. А., 27
Маевский К.К., 26
Мазанов С.В., 174
Мазилин И.В., 96, 134
Мазилкин А. А., 123
Макаров Д.М., 67
Макеев О.А., 53
Малкин А.И., 103
Мальцев М.А., 90
Мальцева С.А., 85
Мартынец В.Г., 25
Мартынова И.А., 31
Махмадалии К., 57
Мацкевич Н.И., 83
Медведев А.Б., 106
Мезинов Н.С., 21
Мейланов Р. Р., 27
Менделеев В.Я., 141
Меньшикова С.Г., 61
Мешалкин А.Б., 25
Мешков В. В., 91
Мешков В.В., 134
Мешков Е.А., 146
Милютин В.А., 35
Минаков А.В., 126
Минаков Д.В., 21, 22, 97
Минина Н.А., 102, 132, 133
Минкин В.С., 174
Мирошниченко Е.А., 71
Мирская В.А., 173, 175
Митропов В.В., 61
Михайлов В.А., 102
Михайлов Д.Л., 133
Моденов А.А., 141
Молодец А.М., 43, 58, 108
Молоканов А.А., 164, 165
Монаенкова А.С., 83
Мороз А.И., 79
Морозов И.В., 21, 71, 90
Мосягин И.Ю., 192
Моталов В.Б., 87, 96
Мубояджян С.А., 95
Мурлиева Ж.Х., 51
Мухамедов Б., 123
Мухамедов Б.О., 85, 191
Нагмутдинова А.И., 96
Назаревич Д.А., 173, 175
Накипов Р. Р., 81
Накипов Р.Р., 172
Наконечный Г.В., 166
Недялков Ю.В., 148
Неручев Ю.А., 67, 73
Неъматов А., 139
Никитин Е.Д., 167
Никифорова Г.Е., 185
Николаев Д. Н., 51
Николаев Д.Н., 34
Новиков А.Н., 81
Новиков Г.Е., 156
Новоселов И.И., 146
Ногинова Л.Ю., 36
Норман Г.Э., 24, 32
Образцов Н.В., 166
Обысов Н.А., 156
Овчинников В.В., 85
Олянина Н.В., 47
Омаров З.М., 99
Онуфриев С.В., 87, 93, 95
Оразбаев С.А., 129
Орлов К.А., 145
Осадчий С.М., 135
Осин С.Б., 115
Осина Е.Л., 90, 115

- Османова Б.К., 36, 37
 Острик А. В., 51
 Острик А.В., 34
 Очков В.Ф., 33, 112, 145
 Пазыл А.С., 122
 Палий Н.А., 133
 Палчаев Д.К., 51, 52, 99
 Паукова А.Е., 152
 Пахомов Е.П., 70
 Пащенко Л.Л., 71
 Петрик Г.Г., 29
 Петров В.А., 18
 Петухов С. В., 94
 Петухов С.В., 89
 Пешкина К.Г., 43
 Пешкичев И.В., 152
 Писарев В.В., 32, 48, 144, 147
 Плетнев А.Е., 34
 Плишкин Н.А., 165
 Поволоцкий И.И., 49, 54
 Поднек В.Э., 39, 170
 Покрасин М.А., 102, 132
 Полев В.Ф., 104
 Полихрониди Н.Г., 117
 Пономарев С.В., 132
 Пономарева А.В., 123, 191
 Попель П.С., 102
 Попов А.П., 167
 Попов В.Е., 166
 Попов Д.А., 103
 Попов И.М., 165
 Попов С.Д., 166
 Постников Е.Б., 148
 Потапов Б.Г., 135
 Прима А.И., 55
 Прокофьев С.И., 123
 Пронкин А.А., 140
 Проняев В.Г., 156
 Пророкова М.В., 137
 Просторова А.О., 62
 Пряжников М.И., 126
 Пугачев В.Ю., 152
 Пятаков Г.Л., 56
 Рабаданов М.Х., 51
 Рабаданова А.Э., 99
 Рагимханов Г.Б., 99
 Раджабов А.Р., 139
 Радченко А.К., 67
 Рамазанов Т.С., 40, 109, 110, 122, 129
 Расчектаева Е.П., 60
 Рафиев С.С., 59, 139
 Рахель А.Д., 34, 92, 107
 Рахманова П.А., 81
 Рейнхольц Х., 109
 Родионов А.В., 106
 Рождественский А.В., 153
 Розиков К.С., 57
 Рощупкин В.В., 102
 Рубцов А., 188
 Рудяк В.Я., 118, 126
 Русанов Б.А., 79, 102
 Русин С.П., 140
 Рыков В.А., 29, 31, 33, 42, 44, 112
 Рыков С.В., 29, 31, 33, 42, 44, 112
 Рышкова О.С., 73
 Рютин С.Б., 156
 Рязанцева А.А., 103
 Рёнке Г., 109
 Савватимский А.И., 87, 93, 95
 Савельев А.С., 160
 Савиных А.С., 58
 Савицкий Д.В., 159
 Савченко И.В., 17
 Сагдеев А.А., 41
 Сагдеев Д.И., 174
 Саенко И.С., 85
 Саидзода К.Б., 76
 Саидов С.М., 45
 Сайтов И.М., 24
 Самошкин Д.А., 17, 83
 Саргсян М.А., 158
 Сафаров М.М., 57, 59, 76, 77, 139
 Сафаров Ш.Р., 57
 Сафонов А.В., 128
 Сафронов А.А., 166
 Сачков И.Н., 154
 Свердлов А.В., 29
 Свириденко В.И., 138
 Сенченко В.Н., 49, 136
 Сенчихин И.Н., 126, 128
 Серба Е.О., 166
 Средкин Н.Н., 95
 Сидаш И.А., 152
 Сиднов К.П., 75
 Сидоров В.Е., 79, 102
 Синева М.А., 71
 Синельщиков В.А., 165
 Синёва С.И., 189
 Скорба В.Р., 81
 Скородумов С.В., 27, 131

- Скрипов П.В., 49, 54, 156, 163, 168
Скрябин А.С., 125
Скурихин А.В., 148
Славин А.В., 23
Смирнов А.С., 74
Смирнов В.Н., 21
Смирнова А. И., 123
Смирнова Д.Е., 181
Смирнова Е.А., 184, 192
Собиров Д.Ф., 77
Соболев Д.В., 108
Соболь О.В., 68
Соколов Н.А., 135
Сокотущенко В.Н., 167
Соловьёв С.Н., 81
Сон Э.Е., 62, 160
Сорогин И.Г., 154
Сорогина Т.И., 154
Сподобин В.А., 166
Станкус С.В., 17, 60, 83
Стариков С.В., 181, 187
Старостин А.А., 163
Старых Р.В., 189
Степанов В.П., 79
Столяренко А.В., 114
Струлева Е.В., 105, 138
Субботин Д.И., 166
Сулейманов М.Г., 137
Сулимов А., 83
Сулимов А.В., 80
Суров А.В., 166
Сухих А.А., 27, 65, 131
Сыздыкова А.Б., 77
Таова Т.М., 72
Татаринов А.С., 79
Терентьев Д.И., 152
Терновой В. Я., 51
Терновой В.Я., 34
Тиллоева Т.Р., 57
Тифлова Л.А., 80, 83
Ткачев Н.К., 39, 43, 46
Ткачѐв Н.К., 84
Томин А.С., 66, 171
Тюфтяев А.С., 160
Узденова А.Н., 69, 117
Усенов Е.А., 122
Усманов Р. А., 81
Усманов Р.А., 169
Устюжанин Е.Е., 33, 112
Уткин П.С., 154
Фабричная О.Б., 85
Файзиев Б.Г., 76
Файзуллин М.З., 66, 167
Файзуллин М.С., 171
Фаляхов Т.М., 89, 94
Фарахов М.И., 169
Флейта Д.Ю., 32
Фокин Л.Р., 69, 116
Фомина М.Г., 174
Фортова С.В., 149, 150, 154
Фролов А.М., 93–95
Хазипов М.Р., 41
Хайрулин Р.А., 17
Хайрутдинов В.Ф., 40, 169
Хакимов Д.Ш., 139
Хасанова Р.Р., 126
Хасанова С.С., 57
Хван А.В., 186
Хвесюк В.И., 122, 144
Хоконов Х.Б., 72
Холиков М.М., 59
Хомкин А.Л., 24
Хомский М.Ю., 160
Хотиенкова М.Н., 20
Хромов М.А., 158
Хубатхузин А.А., 76
Хусайнов З.К., 57
Цветков О.Б., 56, 62
Цветков О.Б. О.Б., 61
Цыганков П.А., 125
Цяо В., 144
Черноскутов М. Ю., 91
Черноскутов М.Ю., 134
Чигвинцев А.Ю., 36
Чиннов В.Ф., 110, 158
Чирков А.Ю., 125
Чуданов В.В., 147
Чусов И.А., 156
Шабатин А.В., 126
Шавелкина М.Б., 160
Шаленов Е.О., 109
Шапиева А.Е., 62
Шахов А.В., 67
Швец И. В., 123
Швец П., 79
Шебзухова И.Г., 72
Шейндлин М.А., 21, 88, 89, 91, 93–95, 142
Шепелев В.В., 150
Шериева Э.Х., 74, 120
Шиш А.И., 65

Школьников Е.И., 127
Шульц О.В., 146, 152
Шулятев Д.А., 123
Шумихин А.С., 24
Шуняев К.Ю., 98
Шутов А.В., 51
Щербаков В.М., 158
Элимханов Д.З., 116
Юдин Д.И., 170

Юдин И.К., 170
Ягодин Д.А., 98
Янилкин А.В., 146
Яничкович Д., 79
Яновский Л.С., 165
Яновский Л.С., 164
Яруллин Л.Ю., 38
Яхьяев Ш.О., 57
Яцук О.С., 17