Институт теплофизики
Уральское отделение РАН

V Российская конференция
с элементами научной школы для молодых ученых

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ
И
ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ

посвященная 90-летию со дня рождения
академика В.П. Скрипова

17-19 октября 2017 г.
Екатеринбург, Россия

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Екатеринбург 2017

УДК 532:536

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ V Российской конференции с элементами научной школы для молодых ученых «Метастабильные состояния и флуктуационные явления», посвященной 90-летию со дня рождения академика В.П. Скрипова, Екатеринбург: ИТФ УрО РАН, 2017 – 86 с.

ISB 978-5-9500793-2-0

Сборник содержит тезисы докладов, представленных на V Российской конференции с элементами научной школы для молодых ученых «Метастабильные состояния и флуктуационные явления» по следующим направлениям: фундаментальные вопросы фазовой метастабильности; молекулярно-динамическое моделирование; флуктуационные явления и теплообмен при фазовых превращениях; кипение, конденсация и кристаллизация; поверхностные явления; теплофизические свойства.

Председатель оргкомитета:

Байдаков В.Г., д.ф.-м.н.

Ученый секретарь:

Волосников Д.В., к.ф.-м.н.

Научный комитет:

Коверда В.П., чл.-корр. РАН
Маркович Д.М., чл.-корр. РАН
Норман Г.Э., д.ф.-м.н.
Станкус С.В., д.ф.-м.н.
Файзуллин М.З., д.ф.-м.н.
Шмельцер Ю.В.П., д.ф.-м.н.
Щекин А.К., чл.-корр. РАН

Конференция проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-08-20470) и Федерального агентства научных организаций России (проект № 007-02-1409)

Издание сборника произведено с авторских листов участников конференции. За ошибки и опечатки авторов издательство ответственности не несет.

ISB 978-5-9500793-2-0 © ИТФ УрО РАН, 2017

THERMODYNAMIC STABILITY LIMIT (SPINODAL) AND ISOMORPHIC PRINCIPLE OF CRITICAL PHENOMENA IN BINARY MIXTURES

Abdulagatov I.M.*[1,2]

[1]*Dagestan State University, Makhachkala, Russia*

[2]*Geothermal Research Institute of the Dagestan Scientific Center of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, Russia*

*e-mail: ilmutdina@gmail.com

Phase stability limits, defined as spinodal curve, and the critical phenomena are subjects of special importance in the material sciences. Beside the fundamental significance of the metastable fluids properties, they have many practical applications in various areas of technology such as, in separation processes, phase stability limits (spinodal) determine the conditions for phase splitting and consequently the required hardware facilities for further separation and purification. In oil production fields, it is necessary to avoid the precipitation of asphaltenes that results in plugging the flowlines and impact oil production negatively. Accurate knowledge of the location of stability limits (spinodal) of binary systems is also very important in safety engineering and materials handling, because stability limits represent conditions beyond which spontaneous and abrupt phase change must occur. The prediction of spinodal, binodal and critical loci, in addition of their industrial importance, furnish a good test for accuracy and thermodynamic consistency of the models for EoS.

In the present work we theoretically predicted spinodal temperature of the binary mixtures using the two-parametric van der Waals EoS and isomorphic principle of critical phenomena in binary mixtures. Mixing rules play important role in the application cubic EoS, like van der Waals model, to the thermodynamic properties of mixtures. Far from the critical point, the mixture rules can be considered in terms of composition of the mixture. However, when approaching to the critical point, the mixture exhibits a pure-fluid-like behavior at fixed chemical potential, μ = constant of the components of the mixtures rather than at fixed composition, x = constant. Therefore, EoS that incorporate this behavior, the Helmholtz energy $A(V,T,x)$ for binary mixture has the same form as the Helmholtz energy of a pure fluid $A(V,T)$ at fixed isomorphic variable $\tilde{x}$, $A(V,T,\tilde{x})$. Thus, the spinodal for binary mixture has the same form as the pure-fluid at fixed chemical potential difference, $\tilde{x} = \Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$, *i.e.*, $-\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T\mu} = -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{Tx} - \frac{\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{Tx}^2}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial x}\right)_{VT}} = 0$, where values of $\left(\frac{\partial \mu}{\partial V}\right)_{Tx}$ and $\left(\frac{\partial \mu}{\partial x}\right)_{PT}$ were calculated using van der Waals EoS for binary mixture with linear mixing rule for molecular size parameter b_x and assuming quadratic rule for the intermolecular interaction parameter a_x. Therefore, the conditions μ = constant and x = constant do not coincide. The difference between the paths μ = constant and x = constant leads to renormalization all of the thermodynamic properties (particularly, K_{Tx} and spinodal curve, for example) in the critical region of a binary mixture. This approach was applied to predict spinodal curve for two mixtures, CO_2+propane and CO_2+butane.

FLUCTUATIONS OF NUMBER OF PARTICLES IN THE FLUID CONFINED IN A NANOPORE

Gor G.Y.*

New Jersey Institute of Technology, Newark, NJ, USA

*e-mail: gor@njit.edu

Thermodynamic properties of fluids confined in nanopores differ from the properties of the same fluids in bulk. Classical examples of these differences are shifts in liquid and vapor spinodals or depression of the freezing point, which are used for characterization of porous materials via nitrogen adsorption porosimetry and thermoporometry respectively. Recent ultrasonic experiments on the fluid-saturated nanoporous materials showed that the fluid compressibility (or the reciprocal property, elastic modulus) is also affected by confinement [1,2].

Compressibility of a fluid can be calculated from the fluctuations of number of particles in the grand canonical ensemble $\beta_T = (V\langle\delta N^2\rangle)/(k_B T\langle N\rangle^2)$. This approach is routinely applied to the systems that are far from being macroscopic [3], which suggests its use for a confined fluid.

Here we report the molecular simulation study of compressibility (modulus) of the Lennard-Jones argon at 87.3 K confined in spherical silica pores of sizes in the range from 2 to 10 nm. We carried out a conventional Monte Carlo simulation in the grand canonical ensemble [4], and calculated the compressibility from the fluctuation of number of particles in the pore for a range of chemical potentials. We found that:

1. For each given pore size, the elastic modulus of the fluid changes linearly with the chemical potential, decreasing with the decrease of the chemical potential. The physical reason for that "softening" is that the decrease of the chemical potential induces negative Laplace pressure. Laplace pressure stretches the fluid making it softer [5].
2. For a given chemical potential, the elastic modulus of the confined argon exceeds the modulus of bulk argon, moreover, it is a linear function of the reciprocal pore size. Elastic modulus of argon in a pore of ca. 2.5 nm in diameter exceeds the modulus of bulk liquid argon by a factor of two [6]. This effect can be also explained by the effective pressure in the pore due to strong solid-fluid interactions.

A simple linear relation between the elastic modulus of a confined fluid and the confining pore size suggests that experimentally measured elastic modulus of a confined fluid, can be used to extract the information about the pore sizes of a material.

References

1. Page J.H. et al. // Phys. Rev. E. 1995. V.52. P. 2763.
2. Schappert K., Pelster R. // Europhys. Lett. 2014. V.105. 56001.
3. Allen M., Tildesley D. Computer simulation of liquids. New York: Oxford. 1989.
4. Norman G.E., Filinov V.S. // High Temperature. 1969. V.7. P. 216.
5. Gor G.Y. // Langmuir. 2014. V.30. P. 13564-13569.
6. Gor G.Y. et al. // J. Chem. Phys. 2015. V.143. 194506.

DESCRIPTION OF THE METASTABLE LIQUID REGION WITH QUINTIC AND QUASI-QUINTIC EQUATION OF STATES

Imre A.R.,*[1,2] Groniewsky A.,[2] Györke G.[2]
[1]*MTA Centre for Energy Research, Budapest, Hungary*
[2]*Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary*
*e-mail: imre.attila@energia.mta.hu

Quintic equations of state are the ones, which can be written with a quintic function of volume (V5). They differ from cubic (V3) equation of states, like van der Waals EoS, in several points. From our point of view, the most important ones are:
– in *p-V* space, for a given pressure value, maximum five volume values can be found (V3-type EoS has maximum three volumes)
– existence of maximum two critical points (V3-type EoS has only one critical point)
– existence of maximum three stable fluid phases (V3-type EoS has maximum two stable fluid phases).

The usage of word «maximum» is intentional; these numbers can be reduced; by properly chosen parameters the «degenerated» quintic equation can behave like a cubic one, showing only one critical point and maximum two co-existing phases. Expanding the definition for quintic EoS (V5), we are going to introduce quasi-quintic ones; these equations cannot be expressed in any explicit form where the volume is on the fifth power, but still the shape of the isotherms in *p-V* space are resembling to a quintic function, showing two minima and two maxima.

We are going to show, that these degenerated V5-type equations (where the «maximal» values of the points mentioned above is not reached) can describe the virtually controversial results obtained by static (inclusion) and dynamic (ultrasound) measurements, concerning the maximal strength (deepest experimentally obtainable negative pressure) for pure water. While in static measurements values around or even below -100 MPa can be reached (on ambient temperature), in ultrasonic measurements, the attainable negative pressure value is only one fourth of this value [1, 2]. The controversy can be properly described by assuming the effect of an already vanished first critical point, i.e. the existence of a Widom-line observable only under negative pressures. This Widom-line is responsible for the increase of the isothermal compressibility, which – being the response function for pressure perturbations – can cause unexpected homogeneous nucleation in a region, still far enough from the near-spinodal states. Therefore – depending on the experimental paths – one can obtain nucleation in very deep negative pressures (near-spinodal region) or in a much higher pressure region, but not very likely in between.

As an interesting consequence, the good applicability of IAPWS equation of state in deep metastable region (i.e. well outside of the validity range) can be also explained in this way.

References

1. Shmulovich K.I. et al. // Geochim. Cosmochim. Acta. 2009. V.73. P. 2457-2470.
2. Caupin F. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2012. V.24. 284110.

HETEROGENEOUS FREEZING OF SUPERCOOLED CLOUD DROPLETS: WHAT CAN BE LEARNED FROM SEMIEMPIRICAL «ICE CONTACT ANGLES»?

Feistel R.,[1] Hellmuth O.,*[2] Schmelzer J.W.P.,[3] Shchekin A.K.[4]

[1]*Leibniz Institute for Baltic Research, Rostock, Germany*

[2]*TROPOS Leibniz Institute for Tropospheric Research, Leipzig, Germany*

[3]*Institute of Physics, University of Rostock, Rostock, Germany*

[4]*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

*e-mail: olaf.hellmuth@tropos.de

Freezing of supercooled cloud droplets is a key process controlling tropospheric cloud and precipitation formation. Ambient aerosols comprise a certain kind of particulate matter, which is able to effectively catalyse the freezing of supercooled cloud droplets by enhancement of the freezing temperature above the homogeneous freezing temperature. The understanding of this catalysing effect is subject of intensive research.

The classical nucleation theory (CNT) is a powerful tool to describe the formation of supercritical ice clusters from their elementary building units, which, however, requires the *a priori* solution of a tricky closure problem. For heterogeneous freezing it is the determination of the three-phase compatibility parameter, i.e. the cosine of the contact angle θ formed at the contact line between a supercooled water droplet (maternal phase), an immersed catalysing substrate (paternal phase), and a freshly nucleated ice embryo (infantile phase). Cloud chamber experiments provide the fraction of frozen droplets, $f_{frz}(T)$, in an ensemble of initially unfrozen supercooled cloud droplets as function of temperature. Combining empirically derived $f_{frz}(T)$ values with CNT, $\theta(T)$ can be inferred as a pseudo-observable by the solution of an inverse task.

Combining experimentally derived $\theta(T)$ values for a well-characterised freezing catalyser (kaolinite) [1] with a macroscopic interface model [2] extrapolated down to nanometric scales, we inferred the value of a residual interfacial energy $\Delta\sigma_X$, that is required to close the interface model. The model is based on the concept of disjoining pressure and considers electrostatic and electrodynamic interaction forces. As an interesting result we found, that the magnitude of the residual molecular interaction force X is in the order of the strength of hydrogen bondings, which is in line with scare information from the literature and with a few independent predictions from MD simulations for the water-kaolinit system. For the closed system of constraints (model plus measurements) we defined a reference state of the «undisturbed system», on the base of which we studied the sensitivity of the ice contact angle against changes in the electric surface charge density of the kaolinit mineral.

References

1. Welti A., Luond F., Kanji Z.A., Stetzer O., Lohmann U. // Atmos. Chem. Phys. 2012. V.12. P. 9893-9907.

2. Israelachvili J.N. Intermolecular and Surface Forces. Amsterdam: Elsevier. 2012.

KAUZMANN TEMPERATURE, KAUZMANN PRESSURE, AND THE CRYSTALLIZATION OF GLASS-FORMING MELTS

Schmelzer J.W.P.*

Institute of Physics, University of Rostock, Rostock, Germany

*e-mail: juern-w.schmelzer@uni-rostock.de

Different problems of the theoretical description of crystal nucleation are discussed [1]. General equations and analytical estimates for the dependence of the thermodynamic driving force of crystallization and the specific interfacial energy melt-crystal of critical crystal clusters on temperature and pressure are derived directly applicable in the analysis of experimental data on crystal nucleation and growth [2-4]. It is shown that at the Kauzmann temperature, corresponding to states where the specific entropies of glass-forming melt and crystal coincide, the thermodynamic driving force has a maximum in dependence on temperature. Extending analytical relations for the specific interfacial energy derived based on Gibbs' classical theory for low and moderate undercoolings down to the Kauzmann temperature, it is demonstrated that the work of critical cluster formation tends to zero in this limit. In addition, similarly to the mentioned well-known notation of a Kauzmann temperature, the concept of a Kauzmann pressure is introduced for crystallization induced by variations of pressure. It is shown that the thermodynamic driving force of crystal nucleation has maxima not only at the Kauzmann temperature but similarly also at the Kauzmann pressure. Estimates of the magnitude of the thermodynamic driving force of crystallization and the specific interfacial energy at these states are also given. These results support suggestions by Kauzmann that the Kauzmann temperature (and for pressure-induced nucleation, the Kauzmann pressure) cannot be reached by a metastable liquid due to intensive crystallization processes occurring in its vicinity. However, it will be also analyzed whether such conclusion can be really retained taking into account the kinetic terms in the expression for the nucleation rate determined by viscosity, respectively, diffusion coefficients and some further possible developments and consequences are discussed. Finally, it is analyzed whether the Kauzmann paradox [5] is really a paradox excluded by laws of nature or merely an untypical at normal conditions type of behavior.

References

1. Schmelzer J.W.P., Abyzov A.S., Fokin V.M. // Int. J. Appl. Glass Sci. 2016. V.7. P. 253-261.
2. Schmelzer J.W.P., Abyzov A.S. // J. Non-Cryst. Solids. 2016. V.449. P. 41-49.
3. Schmelzer J.W.P., Abyzov A.S. // J. Chem. Phys. 2016. V.145. 064512.
4. Schmelzer J.W.P., Abyzov A.S., Fokin V.M. // Int. J. Appl. Glass Sci. 2016. V.7. P. 474-485.
5. Kauzmann W. // Chem. Rev. 1948. V.43. P. 219-256.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF THERMAL FLUCTUATION OF METASTABLE LIQUIDS

Suh D.,*[1] Yasuoka K.[2]

[1]*The University of Tokyo, Tokyo, Japan*

[2]*Keio University, Yokohama, Japan*

*e-mail: suh@photon.t.u-tokyo.ac.jp

Thermal fluctuations in a metastable liquid prior to and post bubble nucleation was analyzed to understand how the motion of a solid impurity inside the liquid will affect the bubble nucleation rate. A constant particle number, temperature, and volume ensemble was used to simulate metastable liquid argon by molecular dynamics. The impurity had metallic Lennard-Jones parameters and a comparison between a system having a freely moving impurity and fixed impurity was conducted. The figure shows an example of the system. The fixed system produced a relatively higher nucleation rate because the movement of the impurity could not hinder void growth in the liquid ambient. The nucleation rate was calculated using the Yasuoka-Matsumoto method [1]. Different sizes and shapes of the seed were examined [2].

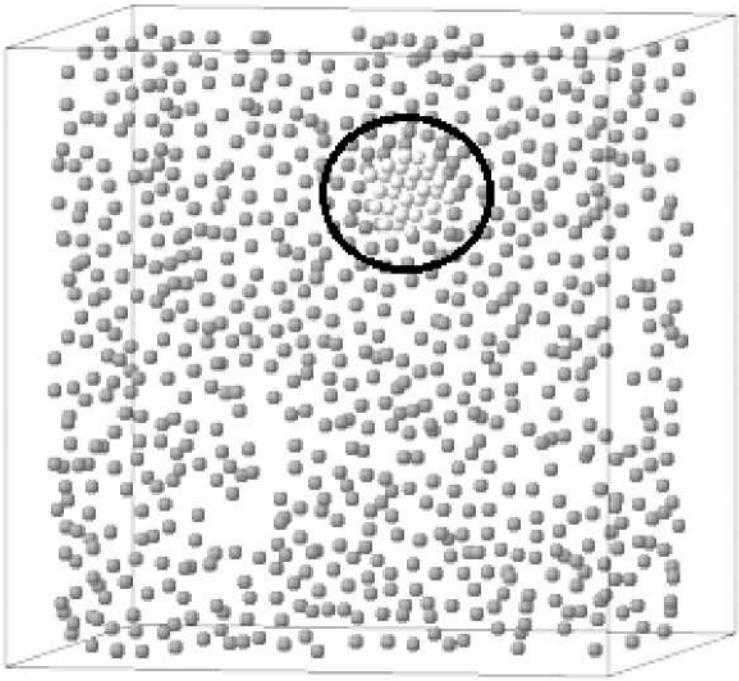


Figure. Slice plot of solid impurity (in circle) in liquid argon system.

References

1. Yasuoka K., Matsumoto M. // J. Chem. Phys. 1998. V.109. P. 8451-8462.
2. Suh D., Nakamura M., Yasuoka K. // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V.656. 012037.

КОНЦЕПЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ В АНАЛИЗЕ НУКЛЕАЦИИ КРИСТАЛЛОВ В СТЕКЛООБРАЗУЮЩЕЙ ЖИДКОСТИ

Абызов А.С.,*[1] Фокин В.М.,[2] Юрицын Н.С.,[3] Родригес А.М.,[2] Шмельцер Ю.[4]

[1]*ННЦ Харьковский физико-технический институт, Харьков, Украина*
[2]*Федеральный университет, Сао-Карлос, Бразилия*
[3]*Институт химии силикатов имени И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия*
[4]*Институт физики университета Ростока, Росток, Германия*
*e-mail: abyzov@kipt.kharkov.ua

Термодинамический барьер, рассчитанный по экспериментальным данным скорости нуклеации кристаллов в стеклообразующей жидкости, демонстрирует аномальное поведение ниже температуры максимума T_{max} скорости нуклеации [1]. Для решения этой проблемы в рамках классической теории нуклеации (CNT) используется концепция пространственной неоднородности стеклообразующих жидкостей для теоретического описания экспериментально измеряемой скорости нуклеации. Предполагается, что нуклеация может происходить эффективно только в жидкоподобных (liquid-like) и подавлена в твердых (solid-like) областях расплава. Соответствующее определение доли liquid- и solid-like областей в зависимости от температуры позволяет достичь полного согласия между CNT и данными эксперимента не только при относительно высоких температурах, но и при температурах ниже T_{max} [2]. Модель успешно протестирована на нескольких силикатных стеклах, в которых возможна объемная гомогенная нуклеация кристаллов. Достоверность применяемой нами гипотезы дополнительно подтверждается корреляцией между изменением соотношения liquid- и solid-like областей и декаплингом вязкости и диффузии (нарушение уравнения Стокса-Эйнштейна-Эйринга [3]). Кроме того, обнаружена сильная корреляция между шириной диапазона температур, где наблюдается резкое изменение соотношения liquid- и solid-like областей, и интервалом температур, в котором происходит стеклование, оцененным методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Результаты анализа мы считаем убедительным доказательством того, что одна и та же эволюция структуры стеклообразующей жидкости при понижении температуры ниже T_{max} приводит как к быстрому замедлению нуклеации, так и к стеклованию.

Литература

1. Abyzov A.S., Fokin V.M., Rodrigues A.M., Zanotto E.D., Schmelzer J.W.P. // J. Non-Cryst. Solids. 2016. V.432. P. 325-333.
2. Abyzov A.S., Fokin V.M., Yuritsyn N.S., Rodrigues A.M., Schmelzer J.W.P. // J. Non-Cryst. Solids. 2017. V.462. P. 32-40.
3. Schmelzer J.W.P., Abyzov A.S., Fokin V.M., Schick C., Zanotto E.D. // J. Non-Cryst. Solids. 2015. V.429. P. 45-53.

ИЗМЕРЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ КРИОГЕННЫХ ЖИДКОСТЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОПТОВОЛОКОННОГО РЕФЛЕКТОМЕТРА

Акашев А.А.,* Гурашкин А.Л.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: Akashev.Anton@gmail.com

Показатель преломления среды n напрямую связан с ее плотностью ρ [1]. В свою очередь величина n может быть определена по коэффициенту отражения света от торца оптоволоконного датчика, погруженного в изучаемую среду. Малые размеры оптоволоконных датчиков, высокая чувствительность и малая инерционность позволяют использовать их для исследования свойств веществ в быстропротекающих процессах и, в частности, в короткоживущих (метастабильных) системах.

Нами разработана и создана экспериментальная установка для измерения показателя преломления с последующим определением плотности в криогенных жидкостях при температурах от 15 до 30 К. Установка, наряду со стабильными фазовыми состояниями, позволяет исследовать и метастабильные.

Показатель преломления среды определяется методом оптоволоконной рефлектометрии [2]. Метод основан на прецизионном измерении интенсивности излучения, отраженного от торца одномодового волоконного световода. Излучение с длиной волны 1550 нм, создаваемое лазерным диодом, проходя через циркулятор, падает на границу раздела двух сред, которую образует торец волокна и исследуемая жидкость. Часть падающего излучения отражается от границы раздела сред и, проходя через второй канал циркулятора, попадает на фотоприемник. Интенсивность отраженного излучения от границы раздела двух прозрачных сред может быть определена в соответствии с формулами Френеля. Инерционность измерительной установки обусловлена теплофизическими процессами на торце оптоволоконного датчика диаметром 9 мкм и составляет единицы микросекунд. Быстродействие используемого фотоприемного устройства составляет 0.1 мкс и является достаточным для проводимых нами экспериментов.

В опытах с жидким азотом проведены пробные измерения показателя преломления на линии фазового равновесия жидкость–газ. Получен рефлектометрический сигнал при T = 77 К и давлениях от 0.1 до 2.0 МПа. На основе экспериментальных значений показателя преломления рассчитана плотность, которая была сопоставлена с литературными данными. Разрешающая способность волоконного датчика оценена по плотности в 0.25 кг/м^3, по давлению – 0.09 МПа.

Литература

1. Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы химии. 3-е изд. Л.: Химия. 1983.
2. Obara K., Ohmura H., Kato C. et al. // J. Low Temp. Phys. 2014. V.175. P. 464-470.

ТЕМПЕРАТУРОПРОВОДНОСТЬ И ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ В СПЛАВАХ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ Ni-V

Ахтямов Э.Р.,*[1] Горбатов В.И.,[2] Полев В.Ф.,[2] Старостин А.А.,[3] Коршунов И.Г.[2,3]

[1]*Институт УралНИИстром, Челябинск, Россия*

[2]*Уральский государственный горный университет, Екатеринбург, Россия*

[3]*Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

*e-mail: verm1@rambler.ru

Сплавы на основе никеля с содержанием ванадия до 40 ат.% являются перспективными материалами для использования в различных отраслях техники. Особый интерес к этой системе возникает еще и потому, что в ней реализуются разнообразные физические состояния вещества, которые в результате различных термических обработок сопровождаются иногда труднообъяснимыми структурными изменениями.

Согласно фазовой диаграмме [1] в этой области концентраций ванадия в неупорядоченных ГЦК сплавах Ni-V (A1) формируется равновесная упорядоченная объемно-центрированная орторомбическая фаза Ni_2V (a = 0.2559 нм, b = 0.7641 нм, и c = 0.3549 нм). Она образуется в сплаве, содержащем 33,3 ат.% V, при температурах ниже T_C = 1193 К с областью гомогенности 2 ат.% V.

В данной работе представлены результаты измерения удельного электросопротивления в интервале 300-1600 К и температуропроводности 800-1600 К сплава Ni-33,3 ат.% V на закаленных, отожженных и состаренных образцах.

Изготовление сплава и его аттестация была произведена в лаборатории прецизионных сплавов Института физики металлов УрО РАН.

Измерения температуропроводности выполняли на двух автоматизированных установках, реализующих метод плоских температурных волн в квазистационарном и динамическом режиме с погрешностью, не превышающей 3%. Скорость нагрева/охлаждения варьировалась в интервале 0.05-10 К/с. Измерения удельного электросопротивления выполняли четырехзондовым стационарным методом в атмосфере гелия с погрешностью 1.5-2 %.

Установлено, что температура упорядочения при нагреве закаленных от 1400 К и состаренных при комнатной температуре (6 лет) образцов составляет 900 К. При охлаждении образцов переход от неупорядоченного твердого раствора к фазе Ni_2V осуществляется при температуре 1200 К.

Показано, что ниже 900 К упорядоченная фаза метастабильна. В области стабильности (900-1200 К) доля упорядоченной фазы Ni_2V в сплаве сильно зависит от скорости нагрева и охлаждения.

Приводятся политермы температуропроводности и электросопротивления.

Литература

1. Диаграмма состояния двойных металлических систем. Под общей ред. академика РАН Н.П. Лякишева. Т.3. Книга 1. М.: Машиностроение. 2001. С. 662-663.

ГРАНИЦА МЕХАНИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Байдаков В.Г.*

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: baidakov@itp.uran.ru

При положительных и отрицательных давлениях рассмотрена устойчивость твердого (изотропного и кристаллического) тела относительно бесконечно малых деформаций. Показано, что по отношению к однородным и неоднородным деформациям граница механической устойчивости определяется разными критериями. Согласно термодинамической теории устойчивости Гиббса ГЦК кристалл теряет свою устойчивость относительно бесконечно малых однородных деформаций, когда нулевое значение принимает первый из изотермических модулей упругости: модуль объемного растяжения K_T, модули простого μ и тетрагонального μ' сдвига. Деформации, при которых достигаются значения $\mu = 0$, $\mu' = 0$, не связаны с флуктуациями плотности. В молекулярно-динамических экспериментах с леннард-джонсовским ГЦК кристаллом установлено, что при положительных и малых отрицательных давлениях потеря неустойчивости обусловлена сдвиговыми деформациями, в то время как при больших отрицательных давлениях кристалл теряет восстановительную реакцию на объемные деформации, т.е. здесь границей механической устойчивости твердого тела по отношению к однородным деформациям является спинодаль ($K_T = 0$).

Построен функционал свободной энергии неоднородного изотропного твердого тела. С использованием данного функционала определена функция изотермического отклика твердого тела на неоднородные деформации, которая является мерой неустойчивости вещества по отношению к возмущениям произвольной длины волны. Показано, что в длинноволновом пределе положение границы устойчивости относительно неоднородных деформаций не совпадает с границей, определяемой однородными деформациями. Неустойчивость изотропного твердого тела проявляется, когда нулевое значение принимает модуль одностороннего сжатия $K'_T = K_T + 4/3\mu$. Аналогичные критерии записаны для трех главных направлений ГЦК кристалла [100], [110] и [111]. По данным молекулярно-динамического моделирования аппроксимирована граница механической устойчивости леннард-джонсовского кристалла относительно неоднородных деформаций. Установлено, что при положительных и малых отрицательных давлениях она располагается за линией, где μ или μ' равны нулю, а при больших отрицательных давлениях – за спинодалью, где $K_T = 0$. Последнее означает, что при отрицательных давлениях, если система не теряет устойчивости относительно процесса зародышеобразования, в твердом теле спинодальные состояния не только достижимы, но оказывается возможным и переход через спинодаль без нарушения однородности вещества. То, что такой сценарий реален, продемонстрировано прямым молекулярно-динамическим моделированием.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 14-19-00567).

ВСКИПАНИЕ ПЕРЕГРЕТОЙ (РАСТЯНУТОЙ) ЖИДКОСТИ ПРИ ЕЁ КОНТАКТЕ С ПЛОСКОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА
(молекулярно-динамическое моделирование)

Байдаков В.Г., Проценко С.П.,* Брюханов В.М.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: sp@itp.uran.ru

Вскипание жидкости обычно происходит на плохо смачиваемых стенках сосудов, дефектах стенок, взвешенных частицах и т.д. Образующиеся таким путем зародыши новой фазы называются гетерогенными. Ввиду наличия множества неконтролируемых факторов интерпретация экспериментальных исследований гетерогенного зародышеобразования чрезвычайно затруднена.

Новые возможности здесь открывают методы компьютерного моделирования. Нами методом молекулярной динамики исследована нуклеация пузырьков в растянутой леннард-джонсовской жидкости, находящейся между плоскими гладкими твердыми стенками. В этом случае основным параметром, определяющим процесс гетерогенного зародышеобразования, является краевой угол. В такой постановке задача имеет аналитическое решение.

Молекулярно-динамическое моделирование проведено при температуре, близкой к температуре тройной точки. Условия смачивания жидкостью твердого тела варьировались изменением энергии взаимодействия частиц жидкости и стенки ε_{12}. Рассчитана зависимость величины равновесного краевого угла Θ парового пузырька от ε_{12}. Для разных значений Θ определены средние времена жизни метастабильной жидкости в рассматриваемой модели. Найдена частота зарождения пузырьков в объеме и в приповерхностном слое. Установлено, что при $0.442 < \varepsilon_{12}/\varepsilon_{11} < 0.544$ ($73 > \Theta > 41$), где ε_{11} – минимальное значение энергии взаимодействия частиц жидкости, зарождение паровой фазы происходит в основном вблизи стенки. Давление предельного растяжения при этом оказывается в 1.33-1.09 раза меньше, чем в случае гомогенного зародышеобразования. Центры спонтанного зародышеобразования локализованы преимущественно на расстоянии 2.5-3 диаметров частиц от стенок ячейки, что составляет около 90% от радиуса критического зародыша, и равномерно распределены по поверхности стенки. Для $\varepsilon_{12}/\varepsilon_{11} = 0.567$ ($\Theta = 27$) и отношения объемов пристеночного слоя и однородной жидкости равного 1/7 до 60% событий вскипания регистрировалось вблизи стенки и около 40% в объеме жидкости. При этом величины приведенных работ гетерогенного и гомогенного зародышеобразования были равны: $W_{het}/(k_BT) = 13.97$, $W_{hom}/(k_BT) = 17.07$.

Рассмотрено влияние размерных эффектов на величину поверхностного натяжения парового пузырька и микроскопический краевой угол. Оценено значение линейного натяжения.

Работа выполнена при поддержке Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-7-12-8) и РФФИ (проект № 15-08-03399).

ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ ГАЗОНАСЫЩЕННЫХ КРИОГЕННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Байдаков В.Г.,* Каверин А.М., Гришина К.А., Хотиенкова М.Н.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: baidakov@itp.uran.ru

Газированная жидкость является слабым раствором, в то время как в ее паровой фазе легколетучее вещество обычно преобладающий компонент. Нами измерена капиллярная постоянная a^2 и определено поверхностное натяжение σ ряда криогенных и низкокипящих жидкостей (Ar, Xe, N_2, O_2, CH_4, C_2H_6, C_3H_8, C_4H_{10}), насыщенных гелием (He) и водородом (H_2). Измерения выполнены дифференциальным капиллярным методом в интервале температуры от тройной точки до близкой к критической и давления от давления фазового равновесия чистого растворителя до ~4.0 МПа. Содержание растворенного вещества в жидком растворителе x определялось по данным о фазовом равновесии и варьировалось от 0 до 3-6 моль%. Ортобарические плотности жидкой и паровой фаз рассчитывались по уравнению состояния раствора.

Для всех исследованных систем барические и концентрационные зависимости a^2 и σ близки к линейным. Несмотря на слабую растворимость He и H_2 в ожиженных газах, обнаружено значительное понижение σ, достигающее десятков процентов от поверхностного натяжения чистого растворителя σ_0. Так, добавка в жидкий метан 3 % водорода (T = 95 К) понижает его поверхностное натяжение на 27 %. Еще большие изменения σ наблюдаются при растворении гелия. Величина $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ существенно зависит от температуры, причем с ее понижением абсолютное значение производной $(\partial\sigma/\partial T)_x$ уменьшается.

Величина и знак производных $(\partial\sigma/\partial p)_T$ и $(\partial a^2/\partial p)_T$ определяются, в основном, природой растворителя. При растворении в криогенных жидкостях (Ar, O_2, N_2) гелия производные $(\partial\sigma/\partial p)_T$ и $(\partial\sigma/\partial x)_T$ меньше нуля. Переход к более высокотемпературным растворителям (C_3H_8, C_4H_{10}) приводит к смене знака производной $(\partial\sigma/\partial p)_T$. Добавка одинаковых количеств разных газов в один и тот же растворитель понижает его поверхностное натяжение примерно на одинаковую величину. Эти и другие особенности в поведении свойств межфазной границы жидкость–газ позволяют обобщить полученные данные по a^2 и σ газированных жидкостей в рамках однопараметрического закона соответственных состояний.

При слабой растворимости газового компонента в объеме жидкой фазы его содержание в поверхностном слое оказывается значительным и резко возрастает с понижением температуры. Концентрация растворенного вещества в поверхностном слое газонасыщенного раствора с x = 3-4 % примерно такая же, как в растворе с полной растворимостью компонентов при x = 30-50 %.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 15-08-03399) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 15-1-2-6).

КИНЕТИКА СПОНТАННОГО ВСКИПАНИЯ ПЕРЕГРЕТЫХ РАСТВОРОВ КРИОГЕННЫХ ЖИДКОСТЕЙ С ПОЛНОЙ ВЗАИМНОЙ РАСТВОРИМОСТЬЮ КОМПОНЕНТОВ

Байдаков В.Г., Каверин А.М.,* Панков А.С.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: kaverin@itp.uran.ru

Кинетика зародышеобразования в растворе в существенной мере определяется диффузионными процессами вблизи растущего пузырька. Являясь более медленными, чем молекулярный обмен, теплоперенос, такие процессы могут приводить к отклонению потока зародышей от седловой точки активационного барьера, нарушая тем самым равновесность состава в критическом зародыше.

Методом измерения времени жизни исследована кинетика спонтанного вскипания перегретых растворов кислород–азот, криптон–аргон и метан–азот. Опыты проведены в интервале средних времен ожидания вскипания $\bar{\tau}$ от 0.1 до 1800 с, при давлениях 0.5, 1.0 и 1.6 МПа и температурах, близких к границе спонтанного вскипания. По полученным данным определены частота нуклеации $J = (\bar{\tau} V)^{-1}$, где V – объем перегреваемой жидкости, ($J = 10^4$-10^8 с$^{-1}$м$^{-3}$) и температура достижимого перегрева раствора T_n при фиксированных значениях J.

Свойства исследованных систем в разной степени отличаются от свойств идеального раствора. Полученные в опыте температуры достижимого перегрева всегда ниже рассчитанных по правилу аддитивности $T_n = T_{n1}(1–x)+T_{n2}x$, где x – мольная доля второго компонента.

Результаты экспериментов сопоставлены с теорией гомогенной нуклеации в растворах [1]. Главная проблема такого сопоставления – отсутствие экспериментальных данных по коэффициентам взаимной диффузии смесей D_{12}. Значения D_{12} были определены из данных о коэффициентах самодиффузии компонентов смесей с привлечением результатов молекулярно-динамического моделирования. При $x = 0$ и 1 достигнутые в опыте значения T_n систематически ниже рассчитанных по теории. Как показано в наших работах [1], это связано с зависимостью поверхностного натяжения критического пузырька от его размера. При составах, близких к эквимолекулярному, достигнутые в эксперименте значения T_n превышают их теоретические значения. Величина ($T_n^{эксп}$ – $T_n^{теор}$) растет с увеличением степени отклонения раствора от идеальности. Если в растворе кислород–азот при $x = 0.5$ отклонения составляют 0.5 К, то в системе метан–азот оно достигает 1-2 К. В докладе обсуждаются возможные причины рассогласования теории и эксперимента в растворах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 15-08-03399) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 15-1-2-6).

Литература

1. Baidakov V.G. Explosive Boiling of Superheated Cryogenic Liquids. Weinheim: Wiley. 2007.

ДВОЙНАЯ МЕТАСТАБИЛЬНОСТЬ СИСТЕМЫ ВОДА–УГЛЕВОДОРОДЫ – ПРЕДТЕЧА ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ

Булейко В.М.,* Григорьев Б.А., Израилев Н.Ю.

Научно-исследовательский институт природных газов и газовых технологий (ООО «Газпром ВНИИГАЗ), Москва, Россия

*e-mail: V_Buleiko@vniigaz.gazprom.ru

С использованием прецизионного адиабатического калориметра исследованы термодинамические свойства и фазовое поведение индивидуальных углеводородных компонентов алканового ряда (метана, этана, пропана, изобутана) и их смесей (включая нормальный бутан, азот и диоксид углерода) в водонасыщенном кварцевом порошке и в объёме при условии гидратообразования. Изучена кинетика процессов образования и разложения гидратов. Исследования выполнены в диапазоне температуры от 235 до 280 К, при давлении до 20 МПа. Фазовые переходы определялись по значениям измеряемых непосредственно скачков теплоёмкости и производной давления по температуре при постоянном объёме. На основе экспериментальных значений теплоёмкости и температурной производной давления при постоянном объёме построены фазовые диаграммы гидратов индивидуальных углеводородов и их смесей. Уточнены значения верхней и нижней квадрупольных точек. Для бинарной системы изобутан–нормальный бутан установлена квинтипольная точка: в трёхкомпонентной системе (нормальный бутан, изобутан, вода) в равновесии находятся пять фаз (вода, лёд, гидрат, жидкие и газообразные бутаны). Фазовое поведение многокомпонентных смесей при термобарических условиях гидратообразования носит достаточно сложный характер. Исследования шестикомпонентной смеси показали, что термобарическая область существования газогидрата распадается на ряд областей существования гидратов различных структур.

Гидратообразование предваряется метастабильным состоянием системы вода–углеводороды. При охлаждении в зону термобарической стабильности гидратов возникает метастабильное (безгидратное) состояние. При отрицательных по Цельсию температурах отмечается область двойной метастабильности, когда система одновременно метастабильна по отношению к двум твердым фазам – гидрату и гексагональному льду. Установлено влияние термической предыстории воды (свежая вода, вода, полученная в результате плавления льда или гидрата) на направление и кинетику процесса формирования твёрдой фазы (льда и/или гидрата) системы, находящейся в состоянии двойной метастабильности. Это влияние носит общий характер как для индивидуальных углеводородов, так и для их смесей. Для одной и той же шестикомпонентной смеси, при одних и тех же термобарических условиях, в зависимости от термической предыстории воды образуется различное количество гидрата структуры *sI* и *sII*.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект № 16-08-0003).

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ФАКТОРОВ НА ПОЛНЫЙ РАЗВАЛ СТРУИ ВСКИПАЮЩЕЙ ЖИДКОСТИ

Бусов К.А.,* Решетников А.В., Мажейко Н.А.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: kbusov@mail.ru

При исследовании истечения струй вскипающих жидкостей через короткие каналы были обнаружены резкие изменения в характеристиках потока. В частности, зафиксировано полное раскрытие струи (течение потока в радиальном направлении). Опыты показали, что полный развал наблюдался при проявлении механизма взрывного вскипания [1] и при наличии прилегающей плоскости за выходным срезом канала, благодаря которой струя захватывалась вследствие эффекта Коанда [2].

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований, направленных на изучение факторов, оказывающих влияние на форму вскипающей струи: изменение кинетики зародышеобразования при добавлении низкокипящего или высококипящего компонента, изменение формы насадка (замена цилиндрического канала на щелевой) и закрутка потока. В качестве рабочей жидкости использовалась вода. Истечение происходило из камеры высокого давления через короткий канал в атмосферу. Канал крепился к рабочей камере с помощью фланца, имеющего диффузорную часть. Исследования проводились в интервале температур от комнатной до 310 ^{0}С при изменении давления до 11 МПа на линии насыщения.

При увеличении концентрации низкокипящего компонента (этанол) в воде полный развал струи наблюдался при более низких температурах и в более узком температурном интервале, чем для чистой воды. В опытах с высококипящим компонентом (глицерин) было установлено, что полный развал струи наблюдался только при малых концентрациях (до 20 об.%) раствора. При этом нижняя и верхняя температурные границы смещались в сторону более высоких температур по сравнению с чистой водой.

В опытах с коротким щелевым каналом (длина l = 0.7 мм, ширина b = 4 мм, высота h = 0.2 мм) полного развала струи не наблюдалось во всем исследованном температурном интервале.

При исследовании влияния закрутки потока на эволюцию формы струи было обнаружено, что при скоростях вращения завихрителя $\omega \leq 900$ об/мин наблюдался устойчивый полный развал струи. Отсутствие полного раскрытия потока было характерно для высоких скоростей вращения $\omega > 1800$ об/мин.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект № 15-08-02210а) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

Литература

1. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. М.: Наука. 1972.
2. Ляховский Д.Н. Кинематический ультрадиффузор и перспективы его применения в топочной технике. Л.: Машгиз. 1955.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДА НА ПОЛИМОРФИЗМ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА ПРИ ФОРСИРОВАННЫХ ЗАТВЕРДЕВАНИЯХ РАСПЛАВОВ

Ватолин Н.А., Белякова Р.М., Полухин В.А., Ригмант Л.К.*

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: l.rigmant@yandex.ru

Водород, как самый поверхностно активный элемент (п.а.э.) периодической системы Д.И. Менделеева, обладает наивысшей диффузионной проницаемостью (ковалентные радиусы атома H~0.028 нм и иона H~0.0136 нм), исключительным адсорбирующим эффектом, растворимостью, теплопроводностью, свойством воздействия на межатомные связи элементов с переводом систем в неравновесные состояния. Наиболее эффективно водород взаимодействует с неметаллами и полупроводниками: с азотом – аммиак, с углеродом – углеводороды, с элементами халькогенидной группы, выделяя O_2 в особую группу – молекулярные халькогениды (свыше 530 ^{0}C H_2Se, 600 ^{0}C H_2S, 730 ^{0}C H_2Te). При взаимодействии с шестивалентным Te водород замыкает на себя значительное количество «плавающих» связей, снижает плотность носителей заряда, создает благоприятные условия для переходов протон↔нейтрон и возможность материала с примесью п.а.э. Te, к аморфизации. В многокомпонентных расплавах переходных металлов (в том числе на основе 3d Fe) легко образуются апериодические кристаллы (квазикристаллы) пяти, десяти и других трансляционных симметрий икосаэдрического когерентного упорядочения, состоящие из 1-3 переходных металлов с обязательным включением элементов главных подгрупп (преимущественно Mg, Al, Si, или Te). В трёхмерное пространство кристаллических решеток их структуры встраиваются поворотными осями упорядочения 5-го порядка известным заполнением Пенроуза из ромбоидов двух видов с углами $72^\circ/108^\circ$ и $36^\circ/124^\circ$. Квазикристаллы классифицируются как интерметаллидные макрокластеры, формируются в гексагональные плотноупакованные (ГПУ) решётки с ковалентными связями микрокластерных элементарных ячеек («строительных блоков»). Встроенные в структуры матриц сложно организованные квазикристаллы (типа Лавеса), обладающие исключительно важными свойствами «лёгкого» деформирования, при получении изделий из многокомпонентных металлических сплавов улучшают, либо создают в них принципиально новые функциональные и эксплуатационные свойства.

ПРЕДЕЛЬНЫЕ РАСТЯЖЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ОБТЕКАНИИ ОСТРОЙ КРОМКИ

Виноградов В.Е.,* Павлов П.А.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: vinve@mail.ru

Ускорение потока жидкости при обтекании твердых включений вызывает локальное понижение давления вплоть до отрицательных значений. В стационарных условиях отрицательное давление, вызывающее образование кавитационных пузырей, невелико [1]. Значительные растяжения могут быть реализованы в импульсных процессах с большими ускорениями.

Разработана и опробована методика получения больших отрицательных давлений в импульсном потоке жидкости на острых кромках твердых тел. Импульсный поток жидкости создавался на острой кромке твердого включения при прохождении слабой ударной волны. Известно, что движение ударной волны в жидкости или газе сопровождается спутным течением за фронтом ударной волны [2]. Поскольку скорость ударной волны в жидкости не менее скорости звука (~1000 м/с), то время роста скорости течения на острой кромке после прохождения ударной волны составляет доли микросекунды. Опыты проводились следующим образом. Пластинка толщиной от 5 до 50 мкм помещалась в центре цилиндрической камеры диаметром 40 мм на расстоянии 40-45 мм от дна и на глубине 10-15 мм от поверхности жидкости, заполняющей камеру. Слабая ударная волна в жидкости создавалась мембраной, являющейся дном камеры, при разряде высоковольтного конденсатора на плоскую катушку, прижатую к мембране. Отрицательные давления на острой кромке возникали при обтекании ее спутным потоком жидкости, следующим за ударной волной.

Острая кромка пластинки в момент после прохождения ударной волны фотографировалась при постепенном увеличении ее амплитуды. По известной амплитуде ударной волны и геометрическим размерам твердого включения рассчитывалась величина отрицательного давления на кромке в момент появления пузырьков и оценивалась частота нуклеации.

Проведены опыты с несколькими жидкостями и твердыми включениями из разных материалов при комнатной температуре. Частота нуклеации в опытах достигала 10^{20}-10^{24} $м^{-3}с^{-1}$. Экспериментально показана возможность реализации значительных отрицательных давлений вплоть до значений, предсказываемых теорией гомогенной нуклеации. Обсуждаются методические проблемы эксперимента и расчетов предельных растяжений и частоты нуклеации.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект №15-1-2-6).

Литература

1. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 2. М.: Наука. 1970.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука. 1986.

ТЕПЛОВОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ПЕРЕГРЕТЫХ РАСТВОРОВ ИЗОПРОПАНОЛА

Волосников Д.В.,* Поволоцкий И.И., Скрипов П.В.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: dima_volosnikov@mail.ru

Данная работа направлена на проверку гипотезы Л.П. Филиппова о наличии дополнительного теплового сопротивления в растворах (относительно аддитивных значений, определяемых в объемных долях) и его взаимосвязи с величиной объема смешения раствора на примере растворов с отрицательным объемом смешения.

Методика состоит в регистрации параметров отклика на импульсное тепловыделение при заданных параметрах функции нагрева $T(t > t_1) = T_{pl} \approx$ const и последующее их сопоставление. Источником тепла и чувствительным элементом служит проволочный зонд – термометр сопротивления. При заданном режиме нагрева для любого момента времени t в опыте измеряются и затем вычисляются значения среднемассовой температуры зонда $T(t)$, мощности его нагрева $P(t)$, плотности теплового потока через его поверхность $q(t)$ и теплового сопротивления вещества $R_\lambda(t) = \Delta T(t)/q$, величина которого обратно пропорциональна коэффициенту теплопроводности $R^{-1} \sim \lambda$.

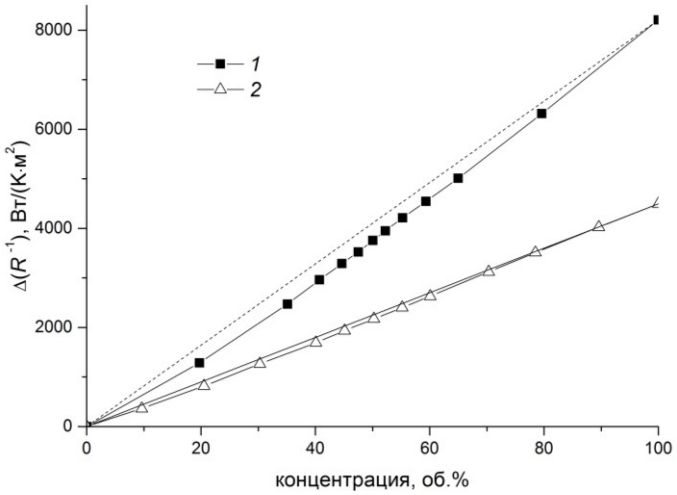


Рисунок. Концентрационная зависимость приращения теплового сопротивления растворов изопропанола с этиленгликолем (*1*), с триэтиленгликолем (*2*) при T_{pl} = 150 ^{0}C и t = 5 мс.

Исследовались образцы растворов вода-изопропанол (5 концентраций), изопропанол-этиленгликоль (13 концентраций), изопропанол-триэтиленгликоль (13 концентраций) (см. рис.). С помощью метода управляемого импульсного нагрева зонда в режиме температурного плато значения теплового сопротивления растворов измерены в широкой области изменения температуры, включая область перегретых состояний. Обнаружено, что обратные значения теплового сопротивления растворов с отрицательным объемом смешения имеют отрицательные отклонения от аддитивных значений. Данное обстоятельство свидетельствует об ухудшении теплопереноса в растворах.

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

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ГАЗОФАЗНОЙ НУКЛЕАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ПАРА НА ОСНОВЕ МД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Воронцов А.Г.,*[1] Коренченко А.Е.,[1] Гельчинский Б.Р.[2]
[1]*Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия*
[2]*Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
*e-mail: vorontsovag@susu.ru

Изучение процесса конденсации пересыщенного металлического пара в инертной атмосфере представляет значительный интерес в связи с развитием технологий получения ультрадисперсных порошков. Наибольшие затруднения возникают при описании начального этапа нуклеации металлических частиц, т.к. отсутствуют не только экспериментальные методики определения свойств комплексов, состоящих из нескольких атомов, но и способы определения термодинамических условий, в которых они находятся. Недостаточность экспериментальных и теоретических данных стимулировала применение методов компьютерного моделирования. Наиболее полная модель должна содержать описание микроскопических процессов взаимодействия отдельных атомов, которое переходит в статистическое описание процесса конденсации, завершающим этапом является моделирование движения парогазовой смеси с учетом изменения ее состава.

В работе решалась задача построения мезоскопической модели конденсации на основе статистического анализа результатов молекулярно-динамического моделирования ранней стадии нуклеации в пересыщенном металлическом паре (Cu в среде Ar). Нами изучались количество столкновений и время каждого столкновения атомов металлического пара и кластеров. Это позволило установить, насколько хорошо количество столкновений описывается формулами классической молекулярно-кинетической теории, а также как проходят неупругие столкновения, приводящие к конденсации. В качестве параметров для построения статистических распределений использовались как термодинамические переменные (концентрация, температура), так и средние параметры отдельных атомов и кластеров (скорости перед соударением, внутренняя энергия, и т.д.)

Оказалось, что для описания числа столкновений при разных плотностях и температурах смеси достаточно применения формул, известных для идеальных газов. Сечение рассеяния малых кластеров в этом случае должно быть определено дополнительно. Результат столкновения и стабильность фрагментов, напротив, зависят от внутренней энергии сталкивающихся частиц, а зависимость от плотности системы и ее температуры проявляется слабо. В то же время, внутренняя энергия кластеров, т.е. энергия, приходящаяся на один атом в системе центра масс кластера, зависит от способа его образования и отличается от энергии теплового движения парогазовой смеси из-за выделения скрытой теплоты. Таким образом, для макроскопического описания конденсации необходимо введение дополнительных макроскопических параметров, связанных с внутренней энергией кластеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-03-04182).

УСТОЙЧИВОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК КРЕМНИЯ, ИНТЕРКАЛИРУЕМЫХ ЛИТИЕМ, НА СЕРЕБРЕ. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Галашев А.Е., Воробьев А.С.*

Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: vorobev@ihte.uran.ru

Методом молекулярной динамики исследована структура двумерного Si и устойчивость дефектов в двухслойном силицене на подложках Ag (001) и Ag (111). Совершенный двухслойный силицен на Ag (001) подложке имеет более низкую энергию, чем его аналог на Ag (111) подложке. Структурные перестройки, происходящие в двумерной системе, не сильно отражаются на форме функции радиального распределения силицена. Влияние подложек главным образом выражается в усилении вертикальных перемещений атомов Si (см. рисунок). Однако расширение зазора между листами силицена и пропускание между ними иона Li^+ в присутствии внешнего электрического поля значительно изменяет также горизонтальную проекцию двумерной структуры Si. Перемещение иона между листами силицена связано со значительными локальными флуктуациями напряжений, действующих в плоскости листов силицена. Причем, в большинстве случаев напряжения в совершенном силицене преобладают над соответствующими напряжениями в дефектном силицене.

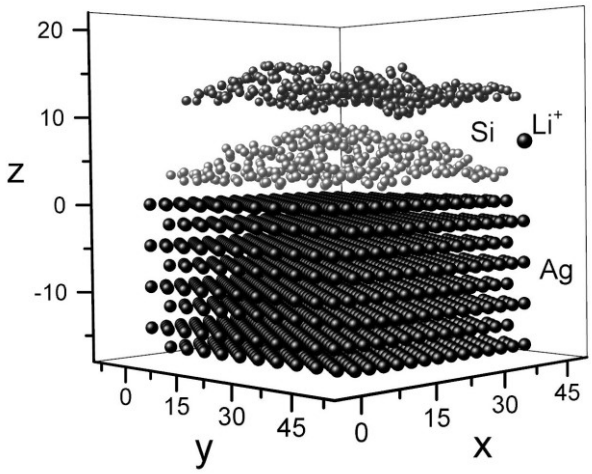


Рисунок. Конфигурация системы «двухслойный силицен на подложке Ag (111)» при начальном зазоре между листами Si 8.5 Å в момент выхода иона Li^+ из плоского канала. Координаты атомов представлены в ангстремах. Постоянное электрическое поле имеет напряженность 10^6 В/м. Вектор напряженности поля **E**, направлен вдоль оси OX. Единичная ячейка силицена содержит 18 атомов Si. Шесть атомов Si единичной ячейки смещены на расстояние 0.065 нм перпендикулярно поверхности, в верхнем листе эти атомы выдвигаются вверх, а в нижнем – вниз.

Движение иона Li^+ по содержащему поливакансии силиценовому каналу возможно только при значительном зазоре между листами и большой величине напряженности электрического поля. В результате перемещения иона лития по дефектному силиценовому каналу, сцепленному с серебряной подложкой с помощью ван-дер-ваальсова взаимодействия, происходит захлопывание поливакансий, значительное искривление листов силицена и увеличение их шероховатости. Такие структурные изменения в конечном итоге разрушают электрод, делая его непригодным для использования в качестве анода литий-ионной батареи.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-13-0061).

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ ИНТЕРКАЛЯЦИИ–ДЕИНТЕРКАЛЯЦИИ ЛИТИЯ В СИЛИЦЕНЕ

Галашев А.Е., Иваничкина К.А.*

Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: ivanichkina@ihte.uran.ru

Кремний обладает рекордной емкостью по обратимому внедрению лития и перспективен в качестве анодного материала для аккумуляторов. Наиболее богатый литием интерметаллид имеет состав $Li_{22}Si_5$, т.е. на один атом кремния, теоретически, может быть интеркалировано 4.4 атома лития, тогда как в графите на шесть атомов углерода может внедриться только один атом лития. Однако при внедрении лития в объемный кремний происходит сильное, почти трехкратное, увеличение удельного объема, приводящее к разрушению электрода. Применение силицена в качестве анодного материала решает эту проблему. В настоящей работе методом молекулярной динамики выполнено моделирование последовательных процессов интеркаляции – деинтеркаляции ионов лития в плоский канал, сформированный листами совершенного силицена.

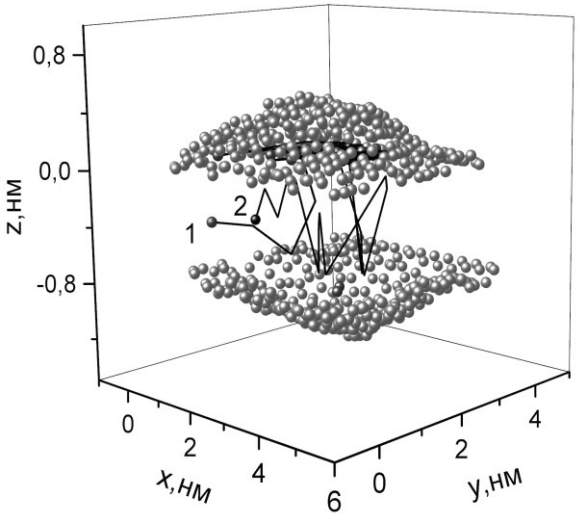


Рисунок. Траектория движения одного из ионов Li^+ в плоском силиценовом канале в ходе процессов интеркаляции-деинтеркаляции: 1 – локализация иона перед интеркаляцией, 2 – местоположение иона после выполнения деинтеркаляции. Ионы вводились в канал один за другим с интервалом 10 пс, через такой же временной промежуток проводилась их последовательная деинтеркаляция. Полностью интеркалировано 16 ионов лития, большинство из которых прикрепились к верхнему листу силицена.

В результате интеркаляции в центральной части верхнего листа сформировался кластер из 13 осажденных атомов лития (см. рисунок). Плотность упаковки атомов Li в кластере соответствует соотношению: 1 Li/4.4 Si, что существенно уступает теоретическому значению (4.4 Li/ 1 Si). Энергия системы значительно увеличивается после внедрения первого иона Li, а затем постепенно уменьшается вплоть до осаждения 10 атомов Li. При последующем внедрении атомов лития энергия системы почти не изменяется. Последовательная деинтеркаляция лития приводит лишь к очень малому увеличению энергии системы и достижению энергетически эквивалентного прединтеркаляционного состояния. Подвижность D атомов Li уменьшается по мере увеличения их количества в канале и стабилизируется при числе атомов металла $n = 12$. При деинтеркаляции наблюдается незначительное увеличение коэффициента D.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 16-13-00061).

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ КИСЛОРОДА В РАСПЛАВЛЕННОМ АЛЮМИНИИ

Галашев А.Е., Рахманова О.Р.*

ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: oksana_rahmanova@mail.ru

Процесс электролитического получения алюминия требует формирования гарнисажа на стенках электролизера и сопровождается газообразованием на подошве анода. Ионы кислорода, попадающие в расплавленный алюминий в результате разложения криолита в сопровождении сильной конвекции, могут быть одной из причин образования газов. Методом молекулярной динамикой изучено поведение ионов кислорода в Al расплавах под действием постоянного электрического поля. Скорость движения ионов O^{2-} от катода к поверхности расплава возрастает, а время поступления первого иона на поверхность уменьшается с увеличением концентрации O^{2-}. Коэффициент подвижности атомов Al и внутренняя энергия расплава Al возрастают, а подвижность ионов O^{2-} уменьшается с увеличением концентрации ионов в системе. В зависимости от концентрации ионов O^{2-} изменяется их распределение по объему металла (Рисунок).

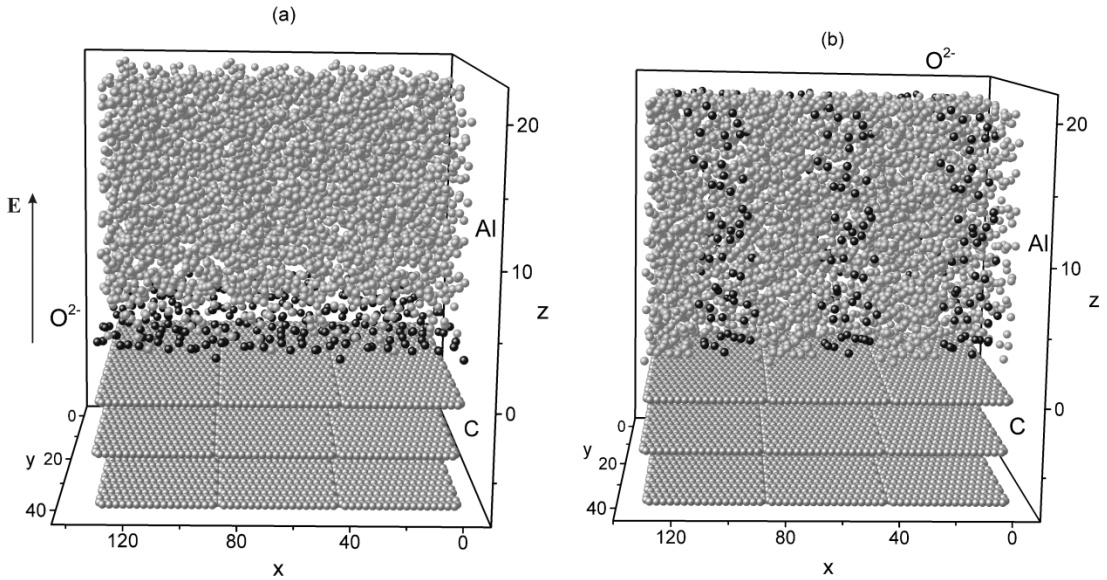


Рисунок. Конфигурации системы «Al-O^{2-} –графит», соответствующие моментам времени (a) 0 пс, (b) 500 пс, где число ионов кислорода N_{oxygen} = 90. Электрическое поле величиной 50 В/м направлено вертикально вдоль оси *Oz*, температура моделирования *T* = 1233 К, ПГУ действуют во всех направлениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, в рамках Федеральной Целевой Программы, соглашение № 14.607.21.0146, уникальный идентификатор проекта RFMEFI60716X0146.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА УПРАВЛЯЕМОГО ИМПУЛЬСНОГО НАГРЕВА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ЖИДКОСТЕЙ

Галкин Д.А.,* Рютин С.Б., Скрипов П.В.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: dmitry.gal10@gmail.com

Теплопроводность является одним из базовых теплофизических свойств вещества, без знания которого невозможен инженерный расчет теплообмена. Существует несколько общепринятых методик измерения теплопроводности. Это стационарные методики плоского слоя и коаксиальных цилиндров, а также нестационарный метод импульсного нагрева тонкого проволочного зонда (Transient Hot Wire Technique (THW)). Поскольку идея THW метода родилась из точного аналитического решения для бесконечного линейного источника тепла, действующего в однородной сплошной среде, отметим наиболее важные условия реального опыта, необходимые для получения адекватных результатов.

Помимо учета факторов, связанных с конечной длиной и ненулевой теплоемкостью материала зонда, наиболее важным условием реализации THW методики является поддержание постоянства теплового потока от зонда в среду и это требование эквивалентно поддержанию постоянной мощности на зонде.

Зонд в процессе нагрева существенно изменяет свое начальное сопротивление. Если материалом зонда служит платина, то нагрев на 5 К приводит к изменению сопротивления на 1.75 %, что делает задачу поддержания постоянной мощности на зонде весьма сложной. Предпринятые ранее попытки решения задачи получения постоянной мощности на зонде успеха не принесли, например, авторы работы [1] написали буквально следующее: «…трудностью при работе с прежней системой было динамическое поведение цепи обратной связи, которая содержала аналоговый перемножитель для поддержания постоянной мощности на протяжении импульса. Было довольно трудно добиться устойчивой работы схемы и малого времени нарастания температуры в широком диапазоне токов нагрузки». В известных на сегодняшний день установках применены мостовые схемы, питаемые постоянным напряжением, с дальнейшим пересчетом получаемых результатов к постоянной мощности [2].

В работе представлено устройство, позволяющее поддерживать мощность с точностью ~0.05 % и результаты измерения теплопроводности на эталонных жидкостях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-08-00381) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 15-20-2-18).

Литература

1. Hakansson B., Andersson P., Backstrom G. // Rev. Sci. Instrum. 1988. V.59. P. 2269-2276.
2. Assael M.J., Antoniadis K.D., Wakeham W.A. // Int. J. Thermophys. 2010. V.31. P. 1051-1072.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛООБМЕНА ПРИ КИПЕНИИ ВОДЫ И ЭМУЛЬСИИ Н-ПЕНТАН/ВОДА В МИНИКАНАЛЕ

Гасанов Б.М.*

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: gbm@itp.uran.ru

Эмульсии с низкокипящей дисперсной фазой предлагается использовать при охлаждении электронных устройств [1] и микрочипов [2]. В последние десятилетия, с целью разработки миниатюрных теплообменных аппаратов, интенсивно исследуются режимы течения и тепломассопереноса при кипении жидкостей в мини (гидравлический диаметр 200-3000 мкм) и микроканалах (10-200 мкм). В ряде случаев интенсифицировать теплообмен при кипении в мини и микроканалах удается за счет введения в жидкость наночастиц (наножидкости).

В настоящей работе исследован теплообмен при кипении воды и эмульсии н-пентан/вода в прозрачном миниканале круглого сечения диаметром 1.1 мм и длиной обогреваемого участка 42 мм. Миниканал устанавливался горизонтально в стеклянной ячейке. Термостатирование производилось прокачкой через ячейку нагретого глицерина. Исследуемые жидкости прокачивались через миниканал термостатом с заданной скоростью и температурой. Для регистрации режимов течения парожидкостной смеси использовалась скоростная видеосъемка.

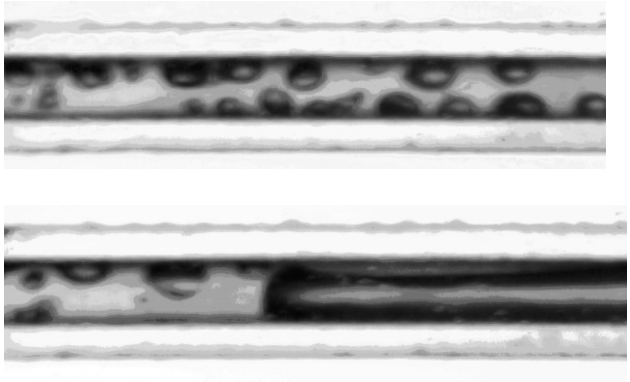


Рисунок. Режимы кипения эмульсии н-пентан/вода в миниканале

При вскипании капелек дисперсной фазы эмульсии на стенках канала образуются «стационарные» паровые пузыри (см. верхний рисунок), которые растут, объединяются между собой и образуют пробковый режим течения смеси (нижний рисунок). Место покинувшей канал парожидкостной смеси занимает новая порция эмульсии, и процессы зарождения, коалесценсии паровых пузырей с образованием пробкового режима течения повторяются. Такой характер кипения наблюдается вплоть до температуры кипения дисперсионной среды. При совместном кипении дисперсной фазы и дисперсионной среды эмульсии, режимы течения парожидкостной смеси аналогичны тем, которые наблюдаются при кипении чистых жидкостей.

Работа выполнена при поддержке Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-6).

Литература

1. Roesle M.L., Kulacki F.A. // Int. J. Heat and Mass Trans. 2012. V.55. P. 2160.
2. Wenzel E.A., Kulacki F.A., Garrick S.C. // Int. J. Heat and Mass Trans. 2016. V.97. P. 653.

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ НА ФАЗОВЫХ ДИАГРАММАХ 1D МАГНЕТИКА ИЗИНГА

Дзюба Ж.В.,* Удодов В.Н., Спирин Д.В.
ФГБОУ ВО «ХГУ им. Н.Ф. Катанова», Абакан, Россия
*e-mail: Dudareva82@gmail.com

На основе обобщенной модели Изинга реализован метод построения фазовых диаграмм 1D наномагнетика. Построение фазовых диаграмм является универсальным методом, позволяющим определить, какие конкретно фазы существуют при заданных значениях температуры, напряженности поля магнетика. Каждая точка на фазовой диаграмме соответствует определенной конфигурации (фазе), реализующейся в наномагнетике. Энергия конфигурации рассчитывается по формуле, приведенной в [1]. Рассмотрим плоскость значений энергии обменного взаимодействия между вторыми соседями J_2 и проекцией внешнего магнитного поля H.

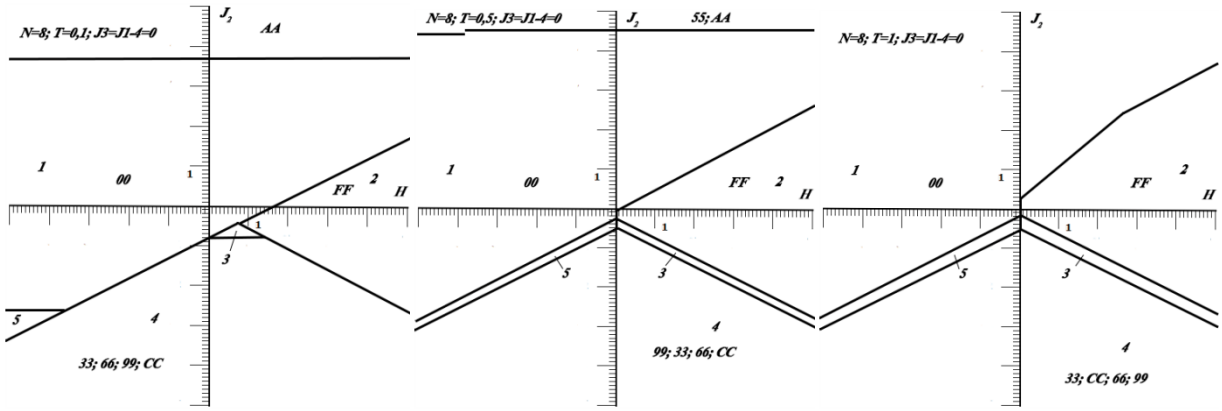


Рисунок. Фазовые диаграммы для системы из N = 8 узлов при разных значениях безразмерной температуры T = 0.1; T = 0.5; T = 1.0 (единицы измерения J_1/kБ). Конфигурации записаны в 16-ой системе счисления.

На фазовой диаграмме при приведенной температуре T = 1 наблюдается пять различных областей: две ферромагнитные области 1 и 2 – они являются наиболее стабильными и отличаются направлением результирующего магнитного момента; область 4 – «33;66;99;CC» соответствует стабильной антиферроманитной конфигурации, в которой чередуются пары спинов; области 5 – «06; 18; 30; 81; 03; 0C; 60; C0» и 3 – «7E; F9; 3F; CF; 9F; F3; FC; E7» соответствуют дефектным ферромагнитным конфигурациям: два спина -1-1-1-1-1$\boxed{11}$-1 и 11111$\boxed{-1-1}$1 «блуждают» по цепочке, нарушая ферромагнитное построение. Заметим, что на диаграммах основных состояний фазы 5 и 3 отсутствуют, т.е. при температуре абсолютного нуля эти фазы теряют свою стабильность. Таким образом, температура способствует установлению ферромагнитного порядка и появлению новых метастабильных фаз 1D магнетика.

Литература

1. Дзюба Ж.В., Удодов В.Н., Спирин Д.В. // ФПСМ. Т.13. № 4. С. 430-436.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ГРАФИТИЗАЦИИ АЛМАЗОВ ДЕТОНАЦИОННОГО СИНТЕЗА

Ефремов В.П.,* Закатилова Е.И.
Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
*e-mail: dr.efremov@gmail.com

Детонационные алмазы – это продукт утилизации углеродных взрывчатых веществ с отрицательным кислородным балансом. В зависимости от условий взрыва, в продуктах детонации могут образовываться микро (водная среда) и наноалмазы (газовая среда). На сегодняшний день в основном данным способом получают детонационные наноалмазы (ДНА).

Частицы ДНА, хотя и имеют кристаллическую решетку алмаза, имеют высокую дефектность на поверхности из-за малости размера и трудноудаляемые летучие и твердотельные примеси, находящиеся в оболочке, окружающей алмазное ядро. Такое сложное строение влияет на свойства частиц. Так, например, температура, которую связывают с началом графитизации частиц ДНА, лежит в широком диапазоне от 670 [1] до 927 ^{0}C [2]. Предложены различные механизмы графитизации в литературных источниках. Так, в [3] этот процесс начинается с поверхности частиц, распространяясь послойно вглубь с повышением температуры. Конечная образовавшаяся фаза представляет собой луковичную структуру. В работе [4] говорится о переходе частиц ДНА в луковичную структуру через образование промежуточной аморфной фазы.

В настоящей работе детонационные алмазы исследовались с помощью синхронного термического анализа, рентгеноструктурного анализа и с помощью электронного микроскопа. Образцы нагревались в атмосфере аргона в тигле с закрытой крышкой. Скорость нагрева составляла 2 и 10 ^{0}C/мин. Максимальная температура нагрева составляла 1500 ^{0}C.

Из рентгеноструктурного анализа получено, что в образце, отожженном до 600 ^{0}C, количество алмаза уменьшилось по сравнению с его содержанием в исходном образце. Однако sp^2 фазы не было обнаружено. Это может означать переход частиц ДНА в аморфное состояние [5]. В образцах, нагретых до 1500 ^{0}C, была обнаружена рентгеноаморфная графитоподобная структура. В зависимости от скорости нагревания в образцах наблюдалось образование углеродных сферических (скорость 10 ^{0}C/мин) и пластинчатых (скорость 2^{0}C/мин) образований.

Литература

1. Xu N.S., Chen J., Deng S.Z. // Diamond and Related Materials. 2002. V.11. P. 249-256.
2. Алексенский А.Е., Байдакова М.В., Вуль А.Я. и др. // ФТТ. 1997. Т.39. № 6. С. 1125-1134.
3. Popov V.A., Egorov A.V., Savilov S.V. et. al.// J. Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2013. V.7. № 6. P. 1034-1043.
4. Zou Q., Wang M.Z., Li Y.G. et. al. // J. Exp. Nanosci. 2010. V.5. P. 473-487.
5. Efremov V.P., Zakatilova E.I. // J. Phys.: Conf. Series. 2016. V.774. 012014.

СПИНОДАЛЬНЫЙ РАСПАД ЗОНЫ МЕТАСТАБИЛЬНОГО ПЛАВЛЕНИЯ В ПРЕДЕЛЕ НУЛЕВОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

Иосилевский И.Л.,*[1] Чигвинцев А.Ю.,[1] Ногинова Л.Ю.,[2] Зорина И.Г.[3]

[1]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, М.О., Россия*

[2] *Российский государственный аграрный университет – МСХА им. К.А. Тимирязева*

[3]*Московский государственный технический университет им. Н.Э Баумана*

*e-mail: ilios@ihed.ras.ru

Современные достижения техники динамического эксперимента по достижению глубоких отрицательных давлений метастабильного (растянутого) состояния конденсированного вещества, как кристалла [1], так и жидкости [2], (см. также обзор [3]) делают содержательным и, в принципе, экспериментально проверяемым обсуждение вопроса о том, чем завершается кривая метастабильного плавления реального вещества в пределе $T \to 0$. Не менее важная информация может быть получена и в рамках так называемого «численного эксперимента», моделирующего плавление и другие фазовые переходы в достаточно реалистичных системах многих тел. Эти ожидания обусловлены, во-первых, заметным прогрессом техники прямого численного моделирования метастабильных состояний классических и квантовых систем: метода функционала плотности [6] и методов квантового Монте-Карло (MC) и молекулярной динамики (MD) ([4-5] и др.), а во-вторых – благодаря накапливаемым в рамках этой техники приемам искусственного затягивания пребывания квазиравновесной системы в метастабильном состоянии. Наконец, весь анализ проблемы может быть дополнен важной информацией, получаемой из рассмотрения идеализированных модельных ситуаций, где свойства плавления в метастабильных состояниях, включая глубокие метастабильные состояния, могут быть вычислены точно. Настоящая работа посвящена такому анализу возможных сценариев завершения метастабильного плавления в пределе $T \to 0$, базирующемуся на свойствах идеализированной безассоциативной кулоновской модели – однокомпонентной плазмы ионов на однородно-сжимаемом компенсирующем фоне OCP(~).

Литература

1. Kanel G., Razorenov S., Baumung K., Singer J. // J. Appl. Phys. 2001. V.90. P. 136.
2. Уткин А.В., Сосиков В.А., Богач А.А. Физика экстремальных состояний вещества. Черноголовка: ИХПФ РАН. 2002. С. 44.
3. Скрипов В.П., Файзуллин М.З. // ТВТ. 1999. Т.37. № 5. С. 814.
4. Bauer G., Ceperley D., Goldenfeld N. // Phys. Rev. B. 2000. V.61. 9055.
5. Хищенко К.В., Фортов В.Е. Физика экстремальных состояний вещества. Черноголовка: ИХПФ РАН. 2002. С. 68.
6. Синько Г.В., Смирнов Н.А. Физика экстремальных состояний вещества. Черноголовка: ИХПФ РАН. 2002. С. 19.

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ЭНТРОПИЙНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

Иосилевский И.Л.*[1,2]

[1]*Объединенный Институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

[2]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

*e-mail: ilios@ihed.ras.ru

В докладе обсуждаются особенности метастабильных состояний в нестандартных *энтропийных* изоструктурных фазовых переходах 1-го рода типа флюид-флюид с критической точкой [1]. Энтропийные («*делокализационные*») фазовые переходы существенно отличаются от хорошо известных *энтальпийных* (Ван-дер-Ваальсовых) фазовых переходов [2], как по структуре фазовых границ, так и, в особенности, по свойствам и структуре зон метастабильных состояний. Обсуждаются аномальные термодинамические свойства, которые присущи энтропийным фазовым переходам, как в их двухфазной области, так и в заметной области регулярного поведения в окрестности критической точки. Наконец, главной отличительной особенностью энтропийных фазовых переходов является наличие дополнительной (третьей) метастабильной области и дополнительной ограничивающей эту область сингулярной кривой с дополнительной сингулярной точкой на вершине. Указанные особенности анализируются и иллюстрируются на примерах энтропийных фазовых переходов (ионизационных, диссоциативных, полимеризационных и др.) в «плотной и горячей материи» водорода, азота и других флюидов.

Литература

1. Iosilevskiy I. // J. Phys.: Conf. Series. 2015. V.653. 012077.

2. Иосилевский И.Л., Старостин А.Н. Проблема фазовых переходов в низкотемпературной плазме. В кн. «Энциклопедия Низкотемпературной Плазмы». Т.III-1. Ред. В.Е. Фортов. М.: Наука. 2000. С. 327-339.

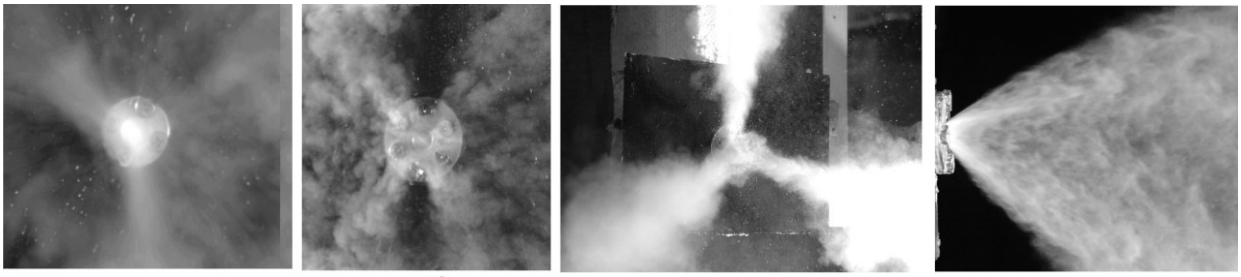
ФОРМА СТРУИ ВСКИПАЮЩЕЙ ЖИДКОСТИ ПРИ ИСТЕЧЕНИИ ЧЕРЕЗ КАНАЛЫ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Капитунов О.А.,[*1] Решетников А.В.,[2] Мажейко Н.А.,[2] Бусов К.А.[2]
[1]*УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*
[2]*Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*
*e-mail: kapitunov.olezhka@mail.ru

Данная работа посвящена экспериментальному изучению влияния каналов различной геометрической формы на изменение формы струи вскипающей жидкости. Актуальность данного исследования связана с проблемой безопасности энергетического оборудования. При разгерметизации сосудов или аппаратов высокого давления могут образоваться отверстия различной геометрии. Поэтому важно знать, как будет эволюционировать вскипающий поток и какие особенности могут проявляться при его истечении, так как геометрия разрыва оказывает существенное влияние на характеристики струи.

В данной работе исследование вскипающей воды происходило при истечении струй из камеры высокого давления через короткие каналы различной геометрической формы (квадратный, треугольный, щелевой, цилиндрический) в атмосферу. Канал крепился к рабочей камере с помощью диффузорного прижимного фланца. Изучение проводилось в широком интервале температур от T = 130 ^{0}C до T = 280 ^{0}C при изменении давления в камере до p = 6 МПа вдоль линии насыщения.

Опыты показали, что при малых перегревах для всех исследованных каналов в форме струи наблюдалась жидкостная сердцевина, окруженная крупными каплями. С ростом температуры происходило увеличение угла раскрытия струи. В форме потока находило отражение той геометрии канала, из которого происходило истечение. Характерной особенностью для трех коротких каналов (цилиндрического, квадратного и треугольного) было проявление полного раскрытия струи выше температуры T = 210 ^{0}C (рисунок). Для щелевого канала полного развала обнаружено не было.



а б в г

Рисунок. Формы струй вскипающей воды (T > 210 ^{0}C) при истечении через короткие каналы: а) – цилиндрический; б) – квадратный; в) – треугольный; г) – щелевой.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №15-08-02210а) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

О ПОВЕДЕНИИ ИЗОБАРНОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ ПРИ ГИПОТЕТИЧЕСКОМ НЕПРЕРЫВНОМ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ ЖИДКОСТЬ–ГАЗ

Каплун А.Б.,* Мешалкин А.Б.

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия

*e-mail: kaplun@itp.nsc.ru

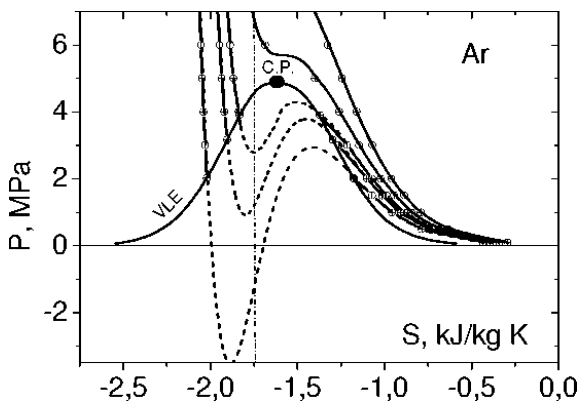
При разработке физически обоснованных единых непрерывных уравнений состояния важную роль играет вопрос о поведении тех или иных термодинамических производных на термодинамической поверхности (ТДП), особенно в метастабильной и лабильной области состояний при гипотетическом непрерывном фазовом переходе (ГНФП).

Ранее [1] нами было строго показано, что изохорная теплоемкость C_V остается положительной всюду на ТДП, в том числе и в лабильной области состояний. Знак изобарной теплоемкости C_P может быть определен из известного соотношения термодинамики $C_P / C_V = (\partial P / \partial V)_S / (\partial P / \partial V)_T$. Поскольку и C_V, и $(\partial P / \partial V)_T$ в лабильной области положительные, то C_P имеет тот же знак, что и производная $(\partial P / \partial V)_S$. Производную $(\partial P / \partial V)_S$ можно преобразовать к виду:

$$(\partial P / \partial V)_S = -(\partial P / \partial T)_S (T / C_V)(\partial P / \partial V)_V, \qquad (1)$$

откуда видно, что знак производной $(\partial P / \partial V)_S$ определяется знаком $(\partial P / \partial T)_S$, поскольку остальные сомножители в (1) являются положительными.

Из рисунка, на котором приведена зависимость давления от энтропии на изотермах, следует, что производная $(\partial P / \partial T)_S$ является существенно положительной величиной. Действительно, если бы где-либо на ТДП производная $(\partial P / \partial T)_S$ на изоэнтропе изменяла бы знак с положительного на отрицательный, то это неизбежно привело бы к пересечению проекций изотерм, т. е. в одной точке при заданных P и S были бы две различные T. А также в лабильной области появятся участки изотерм, где $(\partial P / \partial V)_T = (\partial P / \partial V)_T (\partial P / \partial T)_V < 0$, которые соответствуют устойчивым состояниям. Таким образом, из (1) следует, что всюду на ТДП, в том числе и в лабильной области, производная $(\partial P / \partial V)_S$ не меняет своего знака и остается отрицательной: $(\partial P / \partial V)_S < 0$.



Изобарная теплоемкость при переходе через спинодаль во всей лабильной области становится отрицательной $Cp^{lab} < 0$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 15-08-01072-а).

Литература

1. Каплун А.Б., Мешалкин А.Б. // ТВТ. 2008. Т.46. № 3. С. 383-387.

ВЯЗКОСТЬ РАСПЛАВА АЛЮМИНИЯ ПРИ СТЕКЛОВАНИИ ПО ДАННЫМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кирова Е.М.,*[1,2,3] Писарев В.В.[3,2,1]

[1]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

[2]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

[3] *Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва, Россия*

*e-mail: kirova@phystech.edu

В работе проведено исследование поведения коэффициента кинематической вязкости в процессе стеклования методом молекулярной динамики на примере жидкого алюминия и бинарного расплава [1]. При моделировании процесса изобарного охлаждения был использован потенциал погруженного атома, атомы располагались в виде пленки. Для расчета вязкости использовалась формула Грина-Кубо.

Были получены автокорреляционные функции сдвигового напряжения в плоскости пленки и вдоль направления, перпендикулярного пленке, в диапазоне температур 300-1200 К. Также напрямую получена зависимость коэффициента кинематической вязкости от температуры. Для температур выше температуры стеклования было проведено сравнение с экспериментом [2]. При более подробном исследовании поведения автокорреляционных функций во всем диапазоне температур на малых временах были обнаружены две экспоненциальные асимптотики, а на больших временах при всех рассмотренных температурах наблюдался степенной участок. Таким образом, была получена зависимость показателя степени от температуры, которая объясняет различие между температурами, полученными при помощи других критериев стеклования [3].

Также в работе был рассмотрен процесс нагрева и показан гистерезис по вязкости. Результаты представлены для двух различных температур охлаждения 2×10^{12} К/сек и 4×10^{13} К/сек. Установлено, что чем больше скорость охлаждения, тем больше температура перехода из жидкости в стекло. Этот результат находится в согласии с данными для структурных и калориметрического критериев [4].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 17-79-20391).

Литература

1. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulations. Cambridge: Cambridge University Press. 2005.
2. Ladyanov V.I., Beltyukov A.L., Menshikova S.G., Korepanov A.U. // Phys. Chem. Liquids. 2014. V.52. P. 46.
3. Kolotova L.N., Norman G.E., Pisarev V.V. // J. Non-Cryst. Solids. 2015. V.429. P. 98-103.
4. Schmelzer J. W., Tropin T.V. // J. Chem. Phys. 2013. V.138. 034507.

МАКСИМУМ ЭНТРОПИИ В СЛОЖНЫХ СИСТЕМАХ С 1/*f* СПЕКТРОМ МОЩНОСТИ ФЛУКТУАЦИЙ

Коверда В.П.,* Скоков В.Н.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: koverda@itp.uran.ru

В сложных статистических системах, находящихся далеко от равновесия, могут самопроизвольно возникать экстремально большие флуктуации. Значительная часть энергии таких флуктуаций связана с медленными процессами и в системе возможны крупномасштабные низкочастотные пульсации, спектр мощности которых обратно пропорционален частоте (1/*f* спектр). Другой характерной особенностью таких флуктуаций является масштабно инвариантная функция распределения, которая имеет степенные «хвосты». Важным является вопрос об устойчивости экстремальных низкочастотных пульсаций. Критерием устойчивости может служить максимум статистической энтропии, определяемой по функции распределения стохастических переменных. Считается, что статистическая энтропия Гиббса–Шеннона неприменима для случайных процессов с 1/*f* спектром из-за неинтегрируемости степенных «хвостов».

Сложная система не может быть характеризована единственной функцией распределения переменных. Достаточно подробная теория сложной системы должна содержать систему нелинейных стохастических уравнений, которые находятся в иерархии подчинения и управления. Случайные процессы с экстремальными флуктуациями, характеризующимися 1/*f* спектром мощности, моделируются системой двух нелинейных стохастических уравнений, описывающей взаимодействующие фазовые переходы. Проведен анализ управления и подчинения в этой системе. Показано, что управляющее уравнение системы имеет функцию распределения, которая спадает при возрастании аргумента так же, как и для гауссовского распределения. Поэтому эта функция распределения может быть использована для нахождения информационной энтропии Гиббса–Шеннона. Была рассчитана информационная энтропия для функции распределения переменной, определяемой управляющим стохастическим уравнением. Установлено, что энтропия имеет локальный максимум. Координаты максимума энтропии соответствуют критическому состоянию системы, при котором спектры флуктуирующих величин обратно пропорциональны частоте. Максимум энтропии свидетельствует об устойчивости случайных процессов с $1/f$ спектром флуктуаций.

Таким образом, принцип максимума информационной энтропии может быть использован для исследования устойчивости сложных стохастических процессов.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 15-08-02210*а*) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

Литература

1. Koverda V.P., Skokov V.N. // Physica A. 2012. V.391. P.21-28.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПАР–ЖИДКОСТЬ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ СИСТЕМАХ

Корценштейн Н.М.,* Петров Л.В.

ОАО «Энергетический институт им. Г.М. Кржижановского, Москва, Россия

*e-mail: naumkor@yandex.ru

Объектом исследования данной работы является процесс конденсации, протекающий в объеме пересыщенного пара (объемная конденсация). В отличие от простых систем типа смесь пара с инертным газом задача описания объемной конденсации в многокомпонентных реагирующих системах существенно усложняется в связи с тем, что образование новой фазы сопровождается изменением химического состава сосуществующих фаз. При численном моделировании авторами использован комплексный подход [1], объединяющий возможности химической термодинамики и физической кинетики. В соответствии с подходом, на первом этапе определяется распределение вещества по фазам и состав сосуществующих фаз замкнутой системы в приближении полного термодинамического равновесия. Исходя из данных термодинамического анализа, выбирается схема протекания процесса объемной конденсации в изучаемой системе для рассмотрения кинетики процесса на основе кинетического уравнения для функции распределения капель по размерам (второй этап). При этом предполагается сохранение термодинамического равновесия в газовой фазе. Разработан алгоритм и его компьютерная реализация, позволяющие определять равновесный состав газовой фазы с учетом переменности ее массы в состоянии частичного термодинамического равновесия, а в кинетике объемной конденсации учитывать, наряду с расходом, образование пара вследствие газофазных реакций.

Применение комплексного подхода проиллюстрировано на примере моделирования параметров экологически опасных субмикронных частиц, образующихся в продуктах сжигания углей. Одним из источников указанного вида загрязнения атмосферы является эмиссия субмикронных частиц при сжигании углей. Вероятным механизмом образования субмикронных частиц считается объемная конденсация паров веществ, образующихся из минеральной части углей в процессе горения («solid–vapor–particulate pathway» [2]). Численное моделирование позволяет определить параметры образующихся конденсационных аэрозолей (концентрация, распределение по размерам), что важно для организации их эффективного улавливания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-08-00182).

Литература

1. Корценштейн Н.М., Самуйлов Е.В. // Изв. РАН. Энергетика. 2005. № 3. С. 169-185.
2. Tomeczek J., Palugniok H. // Fuel. 2002. V.81. P. 1251-1258.

ДИНАМИКА РАСПАДА МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ ВЫСОКОЙ ВНЕШНЕЙ И ЗАПАСЕННОЙ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ

Кузнецов В.В.,* Козулин И.А.
Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия
*e-mail: vladkuz@itp.nsc.ru

Рассмотрена динамика неравновесных фазовых переходов со скачкообразным изменением плотности вещества при индуцированном пузырьковом и поверхностном распаде метастабильной жидкости. Проводимые исследования направлены на обоснование систем безопасности энергетических комплексов, разработку МЭМС, основанных на управляемом распаде жидкости [1]. Ранее были изучены различные аспекты взрывного кипения метастабильной жидкости, например [2], но динамика фазового перехода остается мало изученной. В данной работе разработана оригинальная оптическая методика и получены новые экспериментальные данные по динамике распада широкого класса метастабильных жидкостей (вода, спирты, этиленгликоль, предельные углеводороды). Эксперименты проводились с использованием многослойного тонкопленочного нагревателя размером 100x110 мкм при скорости роста температуры до 900 МК/с. Разработан метод расчета взрывного кипения, основанный на учете гомогенного и гетерогенного механизмов зарождения пузырьков, роста давления при распаде жидкости и процессов тепломассообмена при росте пузырьков. Теоретически получен и экспериментально обоснован комплексный механизм пузырькового распада неравновесной системы, обусловленный взаимосвязью гидродинамических, тепловых и волновых процессов при взрывном фазовом переходе, экспериментально и численно определена скорость роста температуры, при которой происходит смена механизма разделения фаз. Предложены и теоретически обоснованы методы управления нуклеацией при наноструктурировании поверхности нагревателя. Выполнено комплексное исследование динамики переходных процессов при поверхностном распаде метастабильной жидкости, вызванном сбросом давления. Установлены закономерности поверхностного распада хладонов и ретроградной жидкости, получены данные о самоорганизации структур на фронте адиабатной волны фазового перехода, динамике температуры и давления за фронтом волны. Установлено, что наиболее достоверным механизмом фазового перехода в этих условиях является неравновесное испарение пересыщенного пара с последующей спонтанной конденсацией вниз по потоку. Определены свойства пульсирующего скачка конденсации пересыщенного пара, установлен физический механизм зарождения волны неравновесного фазового перехода.

Работа выполнена в ИТ СО РАН за счет гранта РНФ №16-19-10519.

Литература

1. Kuznetsov V.V. // J. Phys.: Conf. Series. 2016. V.754. 032012.
2. Скрипов В.П., Синицын Е.Н., Павлов П.А., Ермаков Г.В., Муратов Г.Н., Буланов Н.В., Байдаков В.Г. Теплофизические свойства жидкостей в метастабильном состоянии. М.: Наука. 1972.

СТАДИИ ИСПАРЕНИЯ МИКРОКАПЛИ С БОЛЬШИМ КРАЕВЫМ УГЛОМ: ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Кучма А.Е.,*[1] Щёкин А.К.,[1] Есипова Н.Е.,[2] Татьяненко Д.В.,[1] Ицков С.В.,[2] Савин А.В.[1]

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*
[2]*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия*
*e-mail: an.kuchma@gmail.com

Хорошо известно, что в испарении сидячей микрокапли на плоской гидрофобизированной подложке можно выделить две или три основные стадии в зависимости от начального значения краевого угла. Обычно предполагается, что испарение происходит в режиме стационарной диффузии пара. Теория такого режима для капли с произвольным значением краевого угла при изотермическом испарении была разработана в [1] с использованием полученного ранее аналитического решения сходной задачи электростатики [2]. Представляет интерес сравнить результаты прямого эксперимента по наблюдению за изменением объема и краевого угла сидячей капли со временем с теоретическими предсказаниями. Настоящее сообщение основывается на результатах работы [3], в которой такое сравнение проведено не только для обычно рассматриваемых стадий с сохраняющейся площадью основания капли или сохраняющимся краевым углом, но и для третьей стадии испарения, когда и краевой угол, и площадь основания капли уменьшаются с течением времени. Необходимость исследования третьей стадии обусловлена тем, что ее продолжительность, как видно на эксперименте, может составлять значительную часть полного времени испарения капли. Показано, что наблюдаемое отличие от стационарного режима изотермического испарения на первых двух стадиях может быть объяснено понижением температуры капли вследствие тепловых эффектов, дана количественная оценка влияния тепловых эффектов на динамику испарения капли. Обсуждены особенности механизмов испарения на последней, третьей, стадии и то, как они связаны с гистерезисом краевого угла. Показано также, что и на этой стадии испарение происходит в стационарном режиме, при этом средняя температура капли монотонно приближается к температуре окружающей среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы развития Санкт-Петербургского государственного университета (грант 11.37.183.2014) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 16-03-01140-а).

Литература

1. Popov Y.O. // Phys. Rev. E. 2005. V.71. 036313.
2. Лебедев Н.Н. Специальные функции и их приложения. М.: Техническая литература. 1953.
3. Кучма А.Е., Щёкин А.К., Есипова Н.Е., Татьяненко Д.В., Ицков С.В., Савин А.В. // Коллоид. журн. 2017. Т.79. С. 297.

УЧЕТ РАЗМЕРНО-ЗАВИСИМЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ НУКЛЕАЦИИ НА НЕЙТРАЛЬНЫХ И ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦАХ В РАМКАХ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Лебедева Т.С.,* Щекин А.К.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: tpodguzova@mail.ru

Размерно-зависимые эффекты при образовании капель на смачиваемых незаряженных или заряженных твердых частицах связаны с неоднородностью внутри жидкой части капель. Такие неоднородности обусловлены наличием перекрытия поверхностных слоев: твердая поверхность–жидкость и жидкость–пар. Термодинамически перекрытие можно описать вкладом в химический потенциал молекулы конденсата в капле от расклинивающего давления, которое может быть взято как в случае плоской тонкой жидкой пленки [1,2].

Для случая нейтральных ядер попытки вычислить на молекулярном уровне расклинивающее давление в капельке были предприняты более десяти лет назад [3-5] в рамках нелокального метода функционала плотности. В представленной работе мы хотели расширить исследование для случая заряженного ядра, рассмотрев совместное влияние сил молекулярного взаимодействия молекул конденсата с твердой частицей и электрическим полем заряда ядра, допуская, в том числе, и влияние электрического поля на расклинивающее давление. Аналогичная задача была сформулирована для ион-индуцированной нуклеации в [6], и мы недавно применили этот подход для описания термодинамики нуклеации на частицах молекулярного размера [7,8]. Однако ситуация с наноразмерными и более крупными ядрами конденсации имеет свои особенности.

В данном сообщении мы приводим результаты численного расчета размерно-зависимых эффектов для химического потенциала, расклинивающего давления, работы образования капли, сравниваем их с предсказаниями классической термодинамики [1,2]. Исследования проводились в рамках градиентного метода функционала плотности [9]. Для описания конденсата использовалась модель Карнахана-Старлинга для твердых сфер и приближение среднего поля для межмолекулярного притяжения. Диэлектрическая проницаемость среды считалась зависящей от локальной плотности конденсата.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-03-00281 мол_а).

Литература

1. Kuni F.M., Shchekin A.K., Rusanov A.I., Widom B. // Adv. Colloid Interface Sci. 1996. V.65. P. 71.
2. Shchekin A.K., Podguzova T.S. // Atmospheric Research. 2011. V.101. P. 493.
3. Napari I., Laaksonen A. // J. Chem. Phys. 2003. V.119. 10363.
4. Bykov T.V., Zeng X.C. // J. Chem. Phys. 2002. V.117. 1851.
5. Bykov T.V., Zeng X.C. // J. Chem. Phys. 2006. V.125. 144515.
6. Kitamura H, Onuki A. // J. Chem. Phys. 2005. V.123. 124513.
7. Shchekin A.K., Lebedeva T.S., Tatyanenko D.V. // Colloid J. 2016. V.78. P. 553.
8. Shchekin A.K., Lebedeva T.S., Tatyanenko D.V. // Fluid Phase Equilib. 2016. V.424 P. 162.
9. Shchekin A.K., Lebedeva T.S. // J. Chem. Phys. 2017. V.146. 094702.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ СПОНТАННОГО ВСКИПАНИЯ ПЕРЕГРЕТОГО Н-ПЕНТАНА В СТЕКЛЯННОМ КАПИЛЛЯРЕ

Липнягов Е.В.,* Паршакова М.А.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: e1_ru@e1.ru

Вскипание перегретой жидкости – случайное событие [1]. Оно начинается с появления и последующего роста жизнеспособных пузырьков пара и связано с преодолением активационного барьера.

В опытах по измерению времен жизни перегретого н-пентана τ в широком диапазоне температур при давлениях p = 0.10; 0.29; 0.78 и 1.28 МПа проведена скоростная видеосъемка процесса вскипания. По видеоданным сделаны оценки плотности распределения мест образования паровых зародышей [2]. Выявлено, что вскипание происходит на внутренней поверхности стеклянного капилляра, в котором находится перегреваемая жидкость. Места появления пузырьков распределены крайне неоднородно. Количество активных центров с увеличением давления уменьшается. На рис. 1 представлена типичная температурная зависимость среднего времени жизни $\overline{\tau}(T)_p$, а на рис. 2 приводятся видеокадры начала вскипания для одного наиболее активного центра при том же давлении. При умеренных перегревах ($\overline{\tau} \simeq$ 1000-1500 с.) использовалось ограничение максимальной длительности опыта (цензурирование справа). В работе даны рекомендации по проведению такого эксперимента и статистической обработке данных, включая цензурированные.

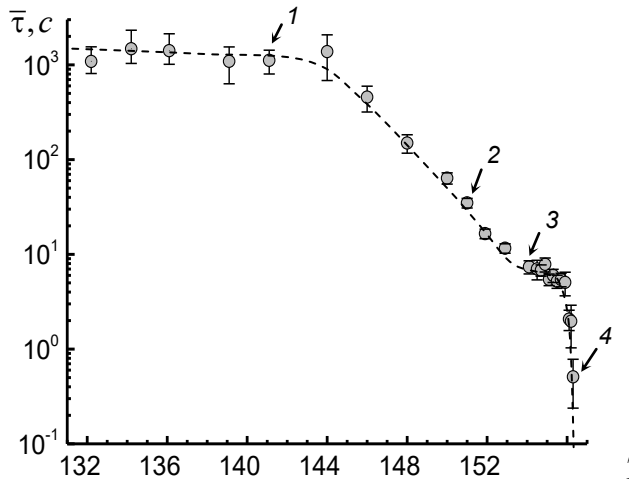


Рисунок 1. Зависимость среднего времени жизни перегретого н-пентана от температуры при p = 0.78 МПа. Точки *1-4* соответствуют состояниям жидкости, показанным на рис. 2.

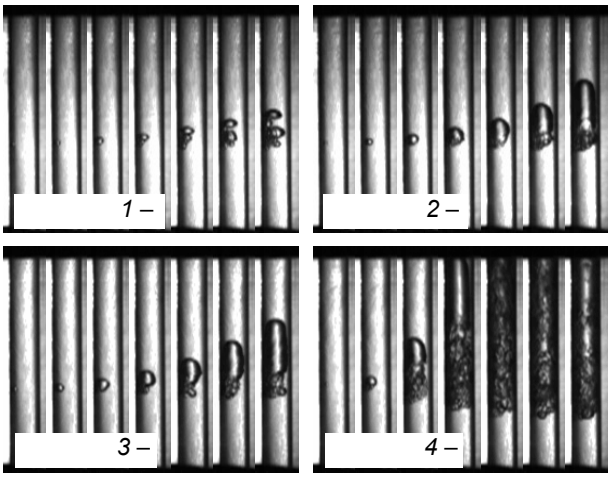


Рисунок 2. Кадры видеосъемки начала вскипания перегретого н-пентана в стеклянном капилляре на одном центре парообразования при p = 0.78 МПа. Время между кадрами – 4.58 мс.

Работа выполнена при финансовой поддержке Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-6).

Литература

1. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. М.: Наука. 1972.
2. Lipnyagov E.V., Parshakova M.A., and Perminov S.A. // Int. J. Heat and Mass Trans. 2017. V.104. P. 1353-1361.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ НЕОДНОРОДНЫХ ПО СОСТАВУ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ТВЕРДОГО РАСТВОРА ПРИ СПИНОДАЛЬНОМ РАСПАДЕ

Ломаев С.Л.,* Васильев Л.С.

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск, Россия

*e-mail: lomayev@bk.ru

Теория распада твердых растворов разрабатывалась на основе теории жидких сред, а также теории фазовых переходов жидкость-пар [1,2]. Несмотря на то, что данный подход дал большой толчок в понимании процессов распада твердых растворов, исследователи столкнулись с затруднениями в теоретическом описании множества метастабильных состояний, возникающих в процессе спинодального распада твердых растворов [2].

Общепризнанными признаками спинодального распада твердых растворов являются: 1) термодинамическая нестабильность высокотемпературной фазы твердого раствора при понижении температуры к любым флуктуациям состава; 2) периодическое распределение растущих флуктуации; 3) отсутствие первоначальных зародышей второй фазы [2].

Один из основных подходов описания спинодального распада в твёрдых растворах, предложенный Канном [3], был основан на теории фазовых переходов Ландау-Гинзбурга, где концентрационные волны играют роль параметра порядка. Свободная энергия твердого раствора представлена в виде квадратичной формы амплитуды концентрационной волны. Эта модель объясняла указанные выше признаки спинодально распада, однако, по-прежнему не могла объяснить ряд наблюдаемых в эксперименте явлений, как, например, фазовые переходы мартенситного типа при спинодальном распаде, или случаи так называемого синодального упорядочения (spinodal ordering) [2].

В настоящей работе предложен теоретический подход, позволяющий учесть вклад более высоких степеней разложения свободной энергии твердого раствора по амплитуде концентрационной волны. В рамках данного подхода впервые доказана термодинамическая устойчивость (метастабильность) состояний твердого раствора с периодическим распределением концентрационных неоднородностей, и дано объяснение указанным выше экспериментальным явлениям.

Работа выполнена в рамках НИОКТР рег.№ АААА-А17-117022250038-7, при поддержке РФФИ и Фонда поддержки научно-проектной деятельности студентов, аспирантов и молодых ученых «Национальное интеллектуальное развитие» в рамках научного проекта №17-33-80031 «мол_эв_а».

Литература

1. Скрипов В.П., Скрипов А.В. // УФН. 1979. Т.128. № 6. С. 193-231.
2. Binder K., Fratzl P. In: Phase Transformations in Materials. Kostorz G (Ed). Chap. 6. Weinheim: Wiley. 2001. P. 409-480.
3. Cahn J.W. //Acta Met. 1961.V.9. P. 795-801.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ СЕЛЕНИДА РТУТИ С ПРИМЕСЯМИ ПЕРЕХОДНОГО МЕТАЛЛА ТЕРМООПТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Лончаков А.Т.,[1] Бобин С.Б.,[1] Дерюшкин В.В.,[1] Котов А.Н,[2] Старостин А.А,*[2] Шангин В.В[2]

[1]*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

[2]*Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия*

*e-mail: astar2006@mail.ru

В физике конденсированного состояния значительное внимание уделяется исследованию систем с сильным спин-орбитальным взаимодействием, которые являются трехмерными аналогами графена – вейлевским полуметаллам. Согласно современным представлениям полуметалл Вейля есть промежуточная фаза между тривиальным изолятором и топологическим изолятором, обладающим дираковским электронным спектром на поверхности [1]. Однако до сих пор на эксперименте не удалось наблюдать переход из фазы вейлевского полуметалла в фазу топологического изолятора в отдельно взятом соединении. Системой, в которой предполагается осуществить такого рода топологический фазовый переход, является селенид ртути – бесщелевой полупроводник без центра пространственной инверсии и инвертированным зонным спектром. Легирование кристаллов HgSe магнитными 3*d*- примесями может привести за счет сильного спин-орбитального и обменного взаимодействия к образованию щели в электронном спектре [3] и, как следствие – к появлению поверхностных электронных состояний дираковского типа.

Актуальна разработка новых методов исследования приповерхностных свойств систем для обоснования возможной принадлежности их к группе топологических материалов. С этой целью в настоящей работе впервые применен для контроля поверхности образцов HgSe с примесями 3*d*-переходных металлов термооптический метод. Суть метода заключается в использовании в качестве локального возмущения греющего импульсного лазерного излучения с последующим анализом временных процессов на поверхности по отраженному лазерному сигналу на другой длине волны.

В качестве объектов исследования использовались образцы номинально чистого HgSe и кристаллы селенида ртути, легированные примесями Co и Fe. В докладе представлены результаты эксперимента по разработанной методике и проведен сравнительный анализ изменения фототермического сигнала в зависимости от вида 3*d*-примеси и ее концентрации. Установлено, что увеличение содержания железа в HgSe приводит к заметному ускорению теплообменных процессов в приповерхностных областях образцов.

Литература

1. Huang S-H et al. // ArXiv. 2015. V.1501. P. 00755.
2. Rui Yu et al. // Science. 2010. V.329. P. 61.
3. Qiao Z. et al. // Phys. Rev. B. 2010. V.82. 161414(R).

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТО–КРЕМНИЙ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Лопаницына Н.Ю.,*[1,2] Куксин А.Ю.,[2] Стариков С.В.[2]
[1]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*
[2]*Московский физико-технический институт, Москва, Россия*
*e–mail: lopanitsyna@phystech.edu

В настоящее время существует большой интерес к исследованию нанообъектов типа core-shell [1,2], так как такие частицы обладают уникальными свойствами, применение которым может быть найдено в биологии, химии, медицине. В частности, core-shell частицы, одной из компонент которых является благородный металл, а другой – диэлектрик или полупроводник, обладают оптическим резонансом в видимом диапазоне [2], где частота резонанса зависит от геометрических параметров частиц. Для того, чтобы синтезировать частицы с желаемыми характеристиками, необходимо понимать механизмы их формирования. В данной работе были рассмотрены процессы, происходящие при образовании золото-кремниевых частиц.

На начальном этапе были протестированы различные модели потенциала взаимодействия золота-кремния и оценены значения величин, важных для моделирования процесса формирования частицы. Было произведено сравнение экспериментальных данных по температурам плавления и поверхностным натяжениям для чистых компонентов с результатами, полученными для разных моделей. Также была оценена скорость диффузии атомов золота и кремния в расплаве для разных потенциалов и сопоставлена с оценками этой же величины, сделанными на основе расчетов по теории функционала электронной плотности.

Было произведено МД-моделирование процессов, происходящих при формировании наночастицы. Было выяснено, что при контакте жидкого золота и кристаллического кремния наблюдается плавление кремния в приповерхностном слое. Соотношение компонентов в расплаве и толщина расплавленного слоя зависят от температуры. Также было выяснено, что концентрация золота в кристалле кремния практически не влияет на растворимость золота в расплаве. Было проведено моделирование охлаждения системы жидкое золото–жидкий кремний. Было показано, что при скоростях охлаждения больших 1К/пс расплав золото–кремний аморфизуется, а при меньших скоростях – расплав кристаллизуется в поликристаллические структуры. В ходе кристаллизации образуются обедненные и обогащенные золотом зоны. Также было обнаружено, что атомы золота стремятся выйти на свободную поверхность или на границу кристаллитов при охлаждении расплава. Было исследовано, как меняется структура поликристалла в зависимости от температуры и скорости охлаждения.

Литература

1. Xu Z., Hou Y., Sun S. // J. Am. Chem. Soc. 2007. V.129. P. 8698-8699.
2. Mohapatra S. et al. // Appl. Phys. Lett. 2008. V.92. 103105.

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ТЕПЛООБМЕН ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРЕВЕ СЛАБЫХ РАСТВОРОВ УГЛЕВОДОРОДОВ С ВОДОЙ

Лукьянов К.В.*

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: r.t.f@bk.ru

Быстрый импульсный нагрев проволочного зонда позволяет избежать влияния конвекции при оценке теплофизических параметров системы. В таком режиме нагрева удается нагревать жидкость до высоких температур, переводя ее в перегретое состояние, за короткие промежутки времени. Оказалось, что малые концентрации примесей могут значительно влиять на время жизни перегретой жидкости, определяя термическую устойчивость жидкости на заданной температуре и заданном интервале времени [1]. Разработанная методика двухимпульсного нагрева с быстрым начальным нагревом проволочного зонда и относительно длительным участком релаксации в области высоких температур позволяет наблюдать значительное влияние малых добавок влаги. Возникающие релаксационные явления зависит от длительности и интенсивности нагрева. В области температур нарушения термической устойчивости углеводородов наблюдается значительное влияние малых добавок влаги на характер и продолжительность изменений температуры зонда от времени для разных образцов при одинаковом режиме нагрева.

В качестве нагревателя используется тонкая (20 мкм) проволока из терморезистивного материала. Такой нагреватель одновременно является термометром сопротивления. Полученные температурно-временные зависимости позволяют оценить наблюдаемые процессы путем расчета коэффициента теплоотдачи с поверхности проволочного зонда. Для оценки использовались средние значения температуры по длине зонда, получаемые из расчета его сопротивления по результатам измерений напряжения разбаланса мостовой схемы с импульсным питанием постоянным током. Значение тока подбиралось для создания похожих температурно-временных условий нагрева для образцов разной влажности. Показано, что в условиях импульсного нагрева малые примеси влаги с концентрацией около 0.003-0.004 % способны оказывать значительное (до 10%) влияние на относительное значение коэффициента теплоотдачи зонда вблизи температуры вскипания исследованных углеводородов (гексан, декан, гексадекан) при атмосферном давлении.

Литература

1. Волосников Д.В., Галкин Д.А., Лукьянов К.В., Старостин А.А., Шангин В.В. // Вестник КНИТУ. 2014. № 21. С. 93-96.

ОЦЕНКА ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ОБЪЕМНОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРЕВЕ

Лукьянов К.В., Смотрицкий А.А.*

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: astar2006@mail.ru

Обычно теплофизические свойства веществ измеряются в устойчивых состояниях. В случае экстремальных условий применения, в частности, в материалах тепловой защиты [1], важно иметь характеристику устойчивости материала к интенсивному нагреву с наиболее вероятной экстраполяцией его свойств в область повышенных температур. В основе такой характеристики предложено использовать данные теплообмена быстро нагреваемого зонда в исследуемых материалах. По причине очевидных экспериментальных сложностей практически отсутствуют данные о тепловых свойствах полимерных материалов в импульсно перегретом состоянии относительно температуры квазистатического терморазрушения. В этой связи развиваются варианты метода импульсного нагрева зонда, имплантированного в диэлектрические полимерные материалы [2,3], и метода численного моделирования параметров теплообмена на основе результатов опыта [4]. Для воспроизведения различных режимов импульсного нагрева разработаны устройства цифрового синтеза функции нагрева и записи температурного сигнала. В опыте регистрируются электрическая мощность $P(t)$, выделяемая в зонде для выполнения заданного температурного режима, и изменение температуры $T(t)$, вычисляемая по изменению сопротивления зонда во время опыта. Возможно построение процедуры идентификации системы по параметрам теплообмена с учетом зависимости свойств от температуры путем сравнения численного решения прямой задачи и данных опыта. В докладе представлены результаты восстановления наиболее вероятных температурных зависимостей эффективных значений теплопроводности и объемной теплоемкости для полиметилметакрилата и отвержденной эпоксидно-диановой композиции при импульсном нагреве в миллисекундных интервалах времени.

Литература

1. Фортов В.Е. // Теплофизические свойства веществ в экстремальных условиях. Казань: Бутлеровские сообщения. 2002. С. 1-7.
2. Skripov P.V., Puchinskis S.E., Begishev V.P., Lipchak A.I., Pavlov P.A. // J. Appl. Polym. Sci. 1994. V.51. P. 1607-1619.
3. Волосников Д.В., Ефремов В.П., Скрипов П.В., Старостин А.А., Шишкин А.В. // ТВТ. 2006. Т.44. № 3. С. 465-471.
4. Rutin S.B., Smotritskiy A.A., Starostin A.A., Okulovsky Y.S., Skripov P.V. // Int. J. Heat and Mass Trans. 2013. V.62. P. 135-141.

РОСТ И РАСТВОРЕНИЕ ПУЗЫРЬКОВ ГАЗА В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСТВОРАХ

Мартюкова Д.С.,* Щёкин А.К., Кучма А.Е.
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
*e-mail: darya.martyukova@gmail.com

Детализированное описание процесса формирования и эволюции пузырьков в растворе является одной из фундаментальных задач при построении общей теории фазовых переходов, решение которой требуется как для адекватного понимания многих природных явлений, так и использования в различных технологических процессах. Дегазация газонасыщенного жидкого раствора в условиях декомпрессии является типичным примером фазового перехода первого рода в двухкомпонентной среде. Быстрая дегазация раствора может сопровождаться существенным разбуханием – увеличением объема раствора в дополнение к образованию газовой фазы. В случае водяного пара, растворенного в расплавленной магме, такое разбухание может привести к извержению вулкана [1].

Теоретическое исследование процесса дегазации включает в себя рассмотрение процесса нуклеации пузырьков в газонасыщенном растворе. В работе [2] было получено кинетическое уравнение для доступного для нуклеации пузырьков объема жидкого раствора при учете перекрытия исключенных объемов вокруг пузырьков. Случай многокомпонентной нуклеации и роста газовых пузырьков, рассмотренный в предлагаемой работе, является более сложным не только из-за возросшего числа компонентов, но и по причине появления перекрестных эффектов. Для случая роста и испарения капель подобные эффекты были рассмотрены в [3,4].

В представленной работе построено описание процесса нуклеации от начального момента до момента, когда доступный объем практически исчезает. Кинетическое уравнение для доступного объема получено с учетом постепенного перекрытия исключенных объемов вокруг пузырьков. В работе представлены также численные решения этого кинетического уравнения при разных начальных пересыщениях компонентов раствора.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-03-01094 А).

Литература

1. Sparks R.S.J // J. Volcanology and Geothermal Research. 1978. V.3. P. 1-37.
2. Kuchma A.E., Shchekin A.K., Bulgakov M.Yu. // Physica A. 2017. V.468. P. 228-237.
3. Кучма А.Е., Щёкин А.К., Мартюкова Д.С., Лёзова А.А. // Коллоид. журн. 2016. Т.78. № 3. С. 325-337.
4. Мартюкова Д.С., Щёкин А.К., Кучма А.Е., Лёзова А.А. // Коллоид. журн. 2016. Т.78. № 3. С. 338-348.

ЧТО МЫ МОЖЕМ УЗНАТЬ О ПРОЦЕССАХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ И РОСТА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ?

Мокшин А.В.*

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, Казань, Россия

*e-mail: anatolii.mokshin@mail.ru

Образование зародышей новой фазы и их последующий рост представляет собой общий сценарий протекания фазовых переходов первого рода в случае метастабильных систем вне области спинодали. В соответствии с классической теорией нуклеации ожидается, что с увеличением уровня метастабильности пространственный масштаб, характеризующий размер критического зародыша (критический размер), уменьшается: устойчивый рост зародыша становится возможным в случае, когда число структурных единиц (атомов, молекул, частиц), его образующих, достигает значений ≥ 10. При таких условиях применение традиционных экспериментальных методов для исследования начальных этапов фазовых переходов, соотносимых с процессами зародышеобразования и роста, становится затруднительным. Однако, с другой стороны, именно наличие малых характерных пространственных масштабов открывает широкие возможности для использования методов моделирования молекулярной динамики.

В настоящем докладе будут представлены методы и подходы, позволяющие в рамках статистического рассмотрения выполнить на основе данных моделирования молекулярной динамики количественный расчет практически всех характеристик процессов зародышеобразования и роста: скорости стационарной и нестационарной нуклеации (зародышеобразования), скорость роста зародышей, скорость фазового перехода, средние времена ожидания зародышей определенного размера, время индукции, размер критического зародыша, свободную поверхностную энергию, фактор Зельдовича, форм-фактор зародыша, а также оценить наиболее вероятный закон роста [1-5].

Работа частично поддержана грантом Президента РФ (молодые доктора наук)(грант № МД-5792.2016.2).

Литература

1. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // J. Chem. Phys. 2015. V.142. 104502.
2. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // J. Chem. Phys. 2014. V.140. 024104.
3. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N., Barrat J.-L. // Phys. Rev. E. 2013. V.87. 062307.
4. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // J. Phys. Chem. B. 2012. V.116. 11959.
5. Mokshin A.V., Barrat J.-L. // Phys. Rev. E. 2010. V.82. 021505.

МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ И АВТОМОДЕЛЬНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАЗВИТИЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ С ДЕФЕКТАМИ

Наймарк О.Б.*

Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Россия

*e-mail: naimark@icmm.ru

Проявления автомодельности играют важную роль в механизмах переноса импульса в конденсированных средах при интенсивных воздействиях, формировании пластических волновых фронтов в твердых телах, закономерностей скейлинга при развитой турбулентности в жидкостях. Обсуждается связь локализованных неустойчивостей, обусловленных коллективным поведением ансамблей мезодефектов, соответствующих им автомодельных решений при пластическом деформировании твердых тел, автомодельными закономерностями поведения жидкостей при больших числах Рейнольдса и ударно-волновых нагружениях. Эти явления связываются с установленным типом критических явлений в конденсированных средах с дефектами – структурно-скейлинговыми переходами. Особенностью переходов является качественное изменение метастабильных реакций в нелинейной системе в терминах структурных переменных, характеризующих ансамбль дефектов [1]. Динамика неравновесных переходов при изменении типов метастабильности сопровождается «подчинением» поведения неравновесной системы различным типам автомодельных решений, с формированием которых связываются качественные различия в поведении конденсированных сред при интенсивных воздействиях. Закономерности скейлинга процессов пластичности, разрушения и турбулентности, анализируются на основе установленных типов автомодельных промежуточно-асимптотических решений, описывающих коллективное поведение мезоскопических дефектов. Теоретические результаты сопоставляются с данными оригинальных экспериментов по динамическому и ударно-волновому нагружению применительно к объяснению автомодельных ударно-волновых фронтов в твердых телах и жидкостях, универсальности статистики флуктуаций в жидкости в условиях развитой турбулентности [1-4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 17-01-00867а).

Литература

1. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. М.: Наука. 1972.
2. Наймарк О.Б. // Физическая мезомеханика. 2015. Т.18. № 3.С.71-83.
3. Наймарк О.Б. // Письма в ЖЭТФ. 1998. Т.67. № 9. С. 751-757.
4. Naimark O.B. // In: Advances in Multifield Theories of Continua with Substructure. Ed.: G. Capriz, P. Mariano. Boston. Birkhauser. 2004. P.75-114.

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОНЕНТОВ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА И ТРИГЛИЦЕРИДОВ – СЫРЬЯ ДЛЯ ЕГО ПРОИЗВОДСТВА

Никитин Е.Д.,* Богатищева Н.С., Попов А.П., Файзуллин М.З.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: e-nikitin@mail.ru

Биодизельное топливо является возобновляемым источником энергии и имеет ряд преимуществ перед дизельным топливом, произведенным из нефти. Биодизельное топливо является смесью метиловых или этиловых эфиров жирных кислот и производится из триглицеридов этих кислот, которые содержатся в животных жирах и растительных маслах. Информация о теплофизических свойствах биодизельного топлива и исходного сырья необходима для разработки технологии производства биодизеля и анализа его горения в двигателе.

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.

Критические параметры измерены для следующих соединений:

- метиловых эфиров *н*-алкановых кислот $CH_3O_2C_nH_{2n-1}$ 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 *н*-алкановых кислот $C_2H_5O_2C_nH_{2n-1}$ с числом атомов углерода в материнской кислоте n = 10, 11, 12, 14, 16, 18.
- триглицеридов *н*-алкановых кислот $C_3H_5[O_2C_nH_{2n-1}]_3$ с числом атомов углерода в материнской кислоте n = 8, 10, 12, 14.

Исследованные соединения являются термонестабильными при околокритических температурах, поэтому измерения выполнены методом импульсного нагрева, разработанным авторами; метод обеспечивает малое разложение веществ в процессе измерений. Погрешности измерения критических параметров: $\delta T_c = 0.01 T_c$ и $\delta p_c = 0.03 p_c$. Получены уравнения для расчета критических параметров метиловых и этиловых эфиров н-алкановых кислот.

Теплоемкость и температуропроводность измерены для этиловых эфиров *н*-алкановых кислот с n = 10, 11, 12, 14, 16 в интервале температуры (290-390) К и триглицеридов н-алкановых кислот с $n = 8$, 10, 12, 14 при температурах от температуры плавления триглицерида до 425 К. 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%. Чистота исследованных образцов (Alfa Aesar, Sigma-Aldrich) составляла 98.5-99.9 мол. %.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-08-00242) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-6).

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Норман Г.Э.,*[1,2] Саитов И.М.[1,2]
[1]*НИУ Высшая школа экономики, Москва, Россия*
[2]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*
*e-mail: genri.norman@gmail.com

Сделан обзор теоретических и экспериментальных данных по фазовым переходам в водороде при высоких давлениях порядка 0.1-10 Мбар. Рассмотрены кривые фазовых равновесий при плавлении и при полиморфных переходах в твёрдом водороде. Особое внимание уделяется фазовому переходу флюид–флюид и переходу твёрдого водорода в проводящее состояние с повышением давления.

Рассмотрены специфические особенности фазового перехода первого рода флюид–флюид, приводящие к подавлению нуклеации в процессе перехода. Обсуждается возможное влияние метастабильных состояний на результаты экспериментальных наблюдений перехода флюид–флюид. Учтены оригинальные результаты авторов доклада.

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ЭФФЕКТЫ И ПЕРЕХОД ЖИДКОСТЬ–СТЕКЛО В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОМ РАСПЛАВЕ ЧИСТОГО МЕТАЛЛА

Норман Г.Э.,[1,2] Писарев В.В.,[1,2,3] Флейта Д.Ю.*[3]
[1]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*
[2]*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*
[3]*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*
*e-mail: fleyta.du@phystech.edu

В данной работе обсуждаются результаты исследования поведения обычной жидкой и метастабильной переохлажденной фазы расплава чистого металла. Коллективное движение изучается с точки зрения определения времени существования долгоживущих кластеров вещества, для этого исследуются получаемые методом молекулярной динамики пространственные корреляционные функции, аналогичные исследуемым в данной работе [1]. Рассмотрены различные многочастичные корреляционные функции высокого порядка, определяемые как в [2], и проведено их дальнейшее исследование в окрестности точки фазового перехода. Получен качественный анализ поведения и физический смысл таких пространственных корреляций дальнего порядка в жидкостях и аморфных метастабильных системах. Приводятся зависимости 4-точечных пространственных корреляционных функций в зависимости от скорости сверхбыстрого охлаждения, а также сорта и количества материала в системе. Другие критерии перехода обсуждались также в [3].

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

Литература

1. Poole P. H., Donati C. // Physica A. 1998. V.261. P. 51-59.
2. Voloshin V. P., Naberukhin Y. I. // J. Struct. Chem. 2013. V.54. P. 233-251.
3. Kolotova L. N., Norman G. E., Pisarev V. V. // J. Non-Cryst. Solids. 2015. V.429. P. 98-103.

ПРИРОДА ПЕРЕХОДА ВОДОРОДА В ПРОВОДЯЩЕЕ СОСТОЯНИЕ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Норман Г.Э.,[1,2] Саитов И.М.*[1,2]

[1]*НИУ Высшая школа экономики, Москва, Россия*

[2]*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

*e-mail: saitovilnur@gmail.com

Проблема фазового перехода флюид–флюид в разогретом плотном водороде/дейтерии изучается экспериментально и теоретически в лучших лабораториях в последнее десятилетие. Однако природа перехода остаётся невыясненной. В этой работе выдвигается новая идея, что при переходе происходит ионизация молекул водорода H_2 с образованием молекулярных ионов H_2^+ и H_3^+.

Применена *ab initio* молекулярная динамика. Используется пакет VASP. Протон-протонные парные корреляционные функции $g(r)$ (ПКФ) и давление рассчитаны в области плотностей водорода, где ожидается фазовый переход. Результаты усредняются по набору равновесных ионных конфигураций. Чтобы выявить характер и природу происходящих изменений, были использованы три способа обработки результатов для $g(r)$.

(1) ПКФ изменяются плавно и медленно с ростом плотности для расстояний r, больших 2 Å. Ситуация резко меняется для меньших r. Значения ПКФ в первом максимуме $g(r_{max1})$ и первом минимуме $g(r_{min1})$ изменяются радикально в узкой области плотностей, где ожидается фазовый переход. Получены скачки функции $g(r_{max1})/\ g(r_{min1})$ при T = 4000, 2500, 1500, 1000 и 700 K. Подобное поведение ожидается до тройной точки, если она существует.

(2) Значение r_{max1} равняется межатомному расстоянию $d_{H_2} = 0.74$ Å в молекуле H_2. Значение r_{min1} близко к межатомным расстояниям $d_{H_2^+} = 1{,}06$ Å и $d_{H_3^+} = 0{,}92$ Å в ионах H_2^+ и H_3^+. Обозначим через $g_1(r)$ и $g_2(r)$ ПКФ при плотностях, ближайших к фазовому переходу до и после него. Найдено, что функция $\Delta g(r) = g_2(r) - g_1(r)$ близка к нулю для r, больших 2 Å, имеет глубокий минимум на расстоянии d_{H_2} и ярко выраженный максимум на расстоянии, близком к $d_{H_3^+}$. Таким образом, при фазовом переходе резко уменьшается концентрация молекул H_2 и возникают ионы H_2^+ и H_3^+. Предложен двухступенчатый механизм фазового перехода, на первом этапе связанный с частичной ионизацией молекул H_2 с образованием молекулярных ионов H_2^+. На втором этапе происходит реакция молекул H_2 с ионами H_2^+ с образованием H_3^+.

(3) Найденные ПКФ при r, больших 2 Å, хорошо моделируются ПКФ для системы мягких сфер с диаметром, близким к d_{H_2}, и концентрацией, равной суммарной концентрацией H_2 и H_2^+, которая при фазовом переходе не меняется.

Были обнаружены метастабильные состояния, что указывает на фазовый переход первого рода. Фазовый переход флюид–флюид в разогретом плотном водороде является уникальным переходом, который может быть связан с предсказанием Нормана-Старостина.

ТЕПЛООБМЕН, ПЕРЕХОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ И КРИЗИСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ КИПЕНИИ И ИСПАРЕНИИ НА МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗАКОНАХ ТЕПЛОВЫДЕЛЕНИЯ

Павленко А.Н.,* Володин О.А., Печеркин Н.И., Суртаев А.С., Кузнецов Д.В.

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия.

*e-mail: pavl@itp.nsc.ru

Представлены результаты цикла комплексных исследований по изучению теплообмена, переходных процессов и кризисных явлений при кипении в условиях свободной конвекции и при испарении и кипении в стекающих пленках жидкостей с использованием различных способов микроструктурирования теплоотдающих поверхностей.

Проведен сравнительный анализ по эффективности теплообмена и критическому тепловому потоку при кипении и испарении в пленках жидкости и смесей жидкостей, стекающих по вертикальным цилиндрам с микротекстурой разной формы.

Приведены новые экспериментальные данные по теплообмену и критическому тепловому потоку для различных законов тепловыделения при кипении в условиях свободной конвекции с использованием новых структурированных капиллярно-пористых покрытий, создаваемых методом плазменного напыления. Важнейшим результатом исследований является экспериментальное выявление того, что на нагревателях со структурированными капиллярно-пористыми покрытиями происходит вырождение развития кризиса кипения при нестационарном тепловыделении и $q < q_{кр.1}$. При нестационарном импульсном тепловыделении на нагревателях с такими покрытиями быстрый переход к плёночному режиму кипения, минуя стадию пузырькового кипения, не наблюдается вплоть до тепловых нагрузок, в 2.5-3 раза превышающих критический тепловой поток при стационарном тепловыделении, что увеличивает времена перехода к закризисному теплообмену более чем на порядок. Наличие структурированных капиллярно-пористых покрытий приводит к существенному изменению параметров вскипания жидкости, характера распространения самоподдерживающихся фронтов испарения, и, в конечном итоге, обеспечивает интенсификацию теплообмена в переходных режимах и увеличение критического теплового потока в нестационарных по тепловыделению условиях.

Представлены результаты экспериментального исследования повторного смачивания сильно перегретых тел стекающей пленкой жидкости. Показано, что время полного охлаждения сильно перегретых пластин стекающей пленкой жидкого азота при наличии на ее поверхности структурированных капиллярно-пористых или низкотеплопроводных покрытий существенно снижается.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 14-49-00010) и гранта РФФИ (проект № 15-08-03221_а).

ДИНАМИКА ОКОЛОКРИТИЧЕСКОГО ПУЗЫРЬКА В МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ

Павлов П.А.*

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: p-pavlov@mail.ru

Предлагается метод расчета любых режимов эволюции паровых пузырьков в растянутой или перегретой жидкости с применением популярного математического пакета Mathcad. Решается система уравнений, содержащая уравнение гидродинамики (УГ) жидкости, окружающей пузырек, уравнение баланса пара в пузырьке (УБ) и уравнение сопряжения внешней и внутренней задач (С). В исходный момент формируется равновесный пузырек критического радиуса $R = R_k$. При этом равновесие системы жидкость–пар сохраняется неограниченное время. Затем радиус пузырька изменяется на малую величину δ и рассчитывается динамика развития пузырька с начальным радиусом $R_0 = R_k + \delta$.

В качестве УГ применено уравнение несжимаемой жидкости с известным способом учета капиллярных и вязкостных сил. Внутренняя задача (УБ) решается в предположении, что большая часть массы пара подчиняется адиабатическому закону сжатия и расширения с показателем γ. Приповерхностная неоднородность температуры пара не учитывается. В результате получено следующее УБ:

$$\frac{dy}{dt} = \frac{3\gamma j}{R\rho_0''} y^{1-1/\gamma} - y\frac{3\gamma}{R}\frac{d}{dt}R; \quad y \equiv \frac{p''}{p_0''}, \qquad (1),$$

где p_0'' – начальное и p'' – текущее давление пара, ρ_0'' – начальная плотность пара. В пузырек направлен поток пара с поверхностной плотностью j. Для расчета плотности потока j применены результаты работ [1,2].

Система трех дифференциальных уравнений (УГ), (УБ) и (С) для безразмерных переменных (радиуса пузыря, скорости изменения радиуса и давления пара) приведена к стандартному виду и решена программой с функцией rkfixed. Решение получается оперативно для любого сочетания свойств и переменных.

Выяснены закономерности роста и коллапса изначально критического пузырька при ступенчатом или периодическом изменении внешнего давления жидкости. Исследована производная $d\left(dR/dt\right)/dR$ при $R = R_k$ (инкремент нарастания радиуса зародыша [3]), необходимая для оценки частоты флуктуационного зародышеобразования в метастабильной жидкости.

Литература

1. Pavlov P.A. // Int. J. Heat and Mass Trans. 2015. V.88. P. 203-209.
2. Pavlov P.A. // Int. J. Heat and Mass Trans. 2017. V.104. P. 627-633.
3. Каган Ю. // ЖФХ. 1960. Т.34. № 1. С. 92-100.

РОСТ ГАЗОВОГО ПУЗЫРЬКА В ВЫСОКОВЯЗКОЙ ГАЗОНАСЫЩЕННОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ ЕЕ БЫСТРОЙ ДЕКОМПРЕССИИ

Пильник А.А.,*[1] Чернов А.А.,[1] Давыдов М.Н.[2]
[1]*Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия*
[2]*Институт гидродинамики имени М. А. Лаврентьева СО РАН, Новосибирск, Россия*
*e-mail: pilnik@itp.nsc.ru

Исследован механизм роста одиночного газового пузырька в высоковязкой газонасыщенной жидкости при ее быстрой декомпрессии. Предложена математическая модель данного процесса, представляющая собой нестационарную диффузионную задачу, решаемую совместно с динамической. Динамика роста пузырька описывается модифицированным уравнением Рэлея-Плессета [1], учитывающим неоднородность вязкости жидкости, обусловленной формированием вокруг пузырька диффузионного погранслоя. Найдено аналитическое решение задачи, хорошо согласующееся с численным в широком диапазоне пересыщений на всех стадиях процесса, включая неравновесную, учет которой крайне необходим, если рассматривать высоковязкие среды. Найдены зависимости профиля концентрации растворенного в жидкости газа, давления газа в пузырьке, скорости изменения массы газа в пузырьке (скорости дегазации), а также скорости роста пузырька от времени. Показано, что по прошествии определенного времени давление газа в пузырьке стремится к давлению окружающей жидкости (диффузионная стадия процесса). Концентрация растворенного в жидкости газа при этом становится функцией только одной переменной, а решение краевой задачи – автомодельным. Отметим, что данное решение является точным. Показано, что решение, полученное ранее другими авторами в приближении квазистационарности процесса, отвечает малым значениям числа Пекле и справедливо лишь при малых начальных пересыщениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 15-08-04474).

Литература

1. Chernov A. A., Kedrinsky V. K., Pil'nik A.A. // Phys. Fluids. 2014. V.26. 116602.

ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ И МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ФЛЮИДОВ

Писарев В.В.*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*e-mail: pisarevvv@gmail.com

Методами атомистического моделирования рассчитаны фазовые диаграммы систем метан-бутан и метан-пентан в координатах давление-температура-состав. Рассмотрены потенциалы взаимодействия TraPPE-UA [1], TraPPE-EH [2] и OPLS-AA [3,4]. Фазовые диаграммы рассчитаны в области, где возможна ретроградная конденсация.

Продемонстрировано, что потенциалы семейства TraPPE лучше подходят для расчетов фазовых диаграмм, при этом полноатомная версия TraPPE-EH показывает наилучшее согласие со справочными данными.

По расчетам фазовых диаграмм в щелевых порах показано, что поверхностные эффекты могут существенно сдвигать критические точки смесей и изменять область ретроградной конденсации.

Проведены расчеты свойств метастабильных фаз в рассмотренных системах. По результатам молекулярно-динамических расчетов оценены кинетические границы устойчивости однофазной системы, в том числе в области ретроградной конденсации.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 17-79-20391).

Литература

1. Martin M.G., Siepmann J.I. // J. Phys. Chem. 1998. V.102. P .2569-2577.
2. Chen B, Siepmann J.I. //J. Phys. Chem. 1999. V. 103. P .5370-5379
3. Jorgensen W.L., Maxwell D.S., Tirado-Rives J. // J. Amer. Chem. Soc. 1996. V.118. P. 11225-11236.
4. Siu S.W.I., Pluhackova K., Böckmann R.A. // J. Chem. Theory Comput. 2012. V.8. P.1459-1470.

ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОС В ГАЗЕ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ НА ПЛОСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ЖИДКОСТЬ-ГАЗ

Поликарпов А.Ф.*

УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*e-mail: Alexey.Polikarpov@urfu.ru

На основе кинетического уравнения Больцмана с интегралом столкновений в форме S-модели решена задача о тепломассопереносе между двумя плоскими параллельными поверхностями раздела фаз, поддерживаемыми при разных температурах. Кинетическое уравнение S-модели может быть записано в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\frac{\partial f}{\partial r} = Q(f, f), \tag{1}$$

где $f(\vec{r},\vec{v},t)$ – функция распределения, $\vec{v}$ собственная скорость молекул газа, $\vec{r}$ – радиус-вектор, t – время. Для кинетического уравнения S-модели оператор $Q(f, f)$ записывается в форме

$$Q(f, f) = \nu(f^S - f), \tag{2}$$

где ν – частота столкновений, f^S – равновесная функция распределения, определяемая выражением:

$$f^S(\vec{r},\vec{v},t) = f^M\left[1 + \frac{2m(\vec{v}-\vec{u})\vec{q}}{15n(r)(kT(r))^2}\left(\frac{m(\vec{v}-\vec{u})^2}{2kT(r)} - \frac{5}{2}\right)\right], \tag{3}$$

здесь $T(r)$ – температура газа, $n(r)$ – числовая плотность, $\vec{u}$ – макроскопическая скорость, $\vec{q}$ – тепловой поток, m – масса молекул газа, k – постоянная Больцмана.

Предполагается, что занимаемый пространство между поверхностями газ является разреженным и вблизи поверхностей находится в термодинамическом равновесии со своей конденсированной фазой. Модельное кинетическое уравнение (1) решалось численным методом дискретных скоростей.

Задача имеет набор определяющих параметров: отношение температур верхней и нижней конденсированной фазы, отношение давлений насыщенного пара вблизи поверхностей раздела фаз и параметр разреженности газа.

В результате решения вышеуказанной задачи были получены распределения макропараметров в пространстве, занимаемом газом, потоки тепла и массы. Установлено, что с увеличением параметра разреженности значения потоков тепла и массы на поверхности раздела фаз уменьшаются.

Работа выполнена в рамках проекта № 3.6064.2017/БЧ базовой части государственного задания высшим учебным заведениям, подведомственным Минобрнауки РФ.

ПОВЫШЕНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНОСТИ ГРАФЕН-МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ ГИДРИРОВАНИЕМ ДЕФЕКТОВ ВРАЩЕНИЯ И ПЛАВАЮЩИХ СВЯЗЕЙ С-С

Полухин В.А., Курбанова Э.Д., Ригмант Л.К.*

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: l.rigmant@yandex.ru

Методом молекулярной динамики исследована термостабильность бинарных композитов, сформированных взаимным наложением металлических нанопленок (Al, Pb, Hg) и двухслойного графена, при его нагреве от комнатной температуры (300 K) до 3000 K. Показано, что гидрирование дефектов вращения связей Стоуна-Уэйлса и периметров графеновых листов позволило стабилизировать сформированными гидридными группами слоистую метал-графеновую структуру. Стабилизация осуществлялась за счет комбинированного эффекта усиления межатомных связей в металлических пленках и армирующих плоскостях графена, а также вследствие торможения диффузионных процессов ловушками – дефектами Стоуна-Уэйлса (с задержкой разрушения исходной структуры и повышением активационного энергетического барьера фазового перехода «твердое–жидкое»). В результате более сильных взаимодействий между атомами в объеме пленки по сравнению с аналогичными взаимодействиями между атомами металла и углерода в прилегающих поверхностях графена, а также взаимодействиями атомов металлов с гидрированными дефектами Стоуна-Уэйлса, как специфическими диффузионными ловушками [1] наблюдалось снижение диффузионной подвижности атомов в плоскостях металлических пленок и повышение температуры их плавления. При нагреве композита изменение компоненты коэффициента самодиффузии атомов металлов в плоскостях горизонтальных сечений демонстрировали монотонные температурные зависимости вплоть до начала плавления, исключая области вблизи 2000 K для алюминия (для ртути при 400 K, а для свинца при 500 K). Дальнейшее увеличение температуры вызвало резкий подъем в подвижностях атомов металла в плоскости, прилегающей к поверхности графена. Этот эффект может быть объяснен потерей дефектами-ловушками энергетической способности гашения подвижности атомов металла [1,2].

Литература

1. Polukhin V.A., Kurbanova E.D. // Russ. Metallurgy (Metally). 2016. V.2016. № 2. P. 131-143.
2. Galashev A.E., Polukhin V.A. // Russ. J. Phys. Chem. B. 2016. V.10. P. 15-22.

ФОРМИРОВАНИЕ СРЕДНЕГО ПОРЯДКА КАК ФАКТОР ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ СТЕКОЛ PD-SI

Полухин В.А., Ригмант Л.К.*

Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: l.rigmant@yandex.ru

Методом молекулярно-динамического моделирования исследованы стадии наноструктурирования переохлаждения бинарных расплавов ($Pd_{80}Si_{20}$, и $Fe_{80}B_{20}$) с контролем скорости их закалки и с «on line» анализом формирования в них сеток из кластерных узлов с политетраэдрической структурой стекол. В режиме скоростного охлаждения, помимо центрированных на атомах металлоидов октаэдрических (Fe-B) и призматических (Pd-Si) координаций атомов металлов, икосаэдрический ближний порядок формировался преимущественно атомами металла. Для умеренных скоростей охлаждения расплавов Pd-Si, помимо ближнего упорядочения, выявлены признаки формирования среднего порядка с четким разрешением предпика на главном пике структурного фактора. В ходе регуляризации в системе $Pd_{80}Si_{20}$ икосаэдрических координаций в масштабе ближнего порядка при последующем охлаждении до 1100 К отмечено когерентное сращивание икосаэдрических кластеров, центрированных на атомах кремния (квазимолекулярных образований), с радиусом упорядочения свыше 0.55 нм в интервале кроссовера T_A ~ 1100±50 K (T_A ~$2T_g$). Именно с этого температурного интервала начинает ускоряться образование более масштабных координационных сфер размера 10-15 нм из центрированных кремнием кластеров с последующим воспроизведением при охлаждении процесса кластерной перколляции. Такое различие стеклования исследованных систем связано, по нашему мнению, с особенностями гибридизации s-d орбиталей Si и Pd, обеспечивающими формирование среднего порядка и повышенную устойчивость при таком структурировании метастабильного состояния. Следует отметить специфику атомной динамики релаксационных движений, представляющих собой противоположно направленные и взаимокомпенсируемые импульсы вихревых смещений по границам флуктуаций с повышенными плотностями (зон сгущения, коррелирующих с масштабом среднего упорядочения), одновременно реализующих механизмы сброса как флуктуационных, так и остаточных деформационных напряжений закалки на пути системы к более устойчивому метастабильному равновесию.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ КВАЗИЖИДКОСТНОГО СЛОЯ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА ПРИ ПРЕДПЛАВЛЕНИИ

Проценко К.Р.,* Байдаков В.Г.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: protcenko.kseniya@gmail.com

На кривой сублимации экспериментально наблюдается явление предплавления – образование квазижидкостного слоя на поверхности кристалла при температурах ниже температуры тройной точки [1]. В работе методом молекулярной динамики в системе леннард-джонсовских частиц исследуется структура квазижидкостного слоя посредством анализа профиля числовой плотности и температурной зависимости параметра Линдемана и коэффициента самодиффузии в объеме кристаллической фазы и в поверхностных слоях.

Исследуемые системы содержали от 64000 до 100000 частиц с радиусом обрезания потенциала взаимодействия $r_c = 6.78\sigma$ (σ – линейный параметр потенциала Леннард-Джонса). Рассмотрены три ориентации (100), (110) и (111) кристалла к межфазной границе.

Параметр Линдемана в поверхностных слоях кристалла значительно больше, чем в объеме и не показывает существенных отличий для различных ориентаций. При температурах ниже температуры тройной точки проведено сравнение коэффициента самодиффузии в поверхностных слоях кристалла с коэффициентом самодиффузии леннард-джонсовской жидкости [2]. По данным о профиле числовой плотности системы рассчитана толщина квазижидкостного слоя l. Установлено, что вблизи тройной точки $l(T) \sim \ln(1 - T/T_t)$, где T_t – температура тройной точки (см. рис.).

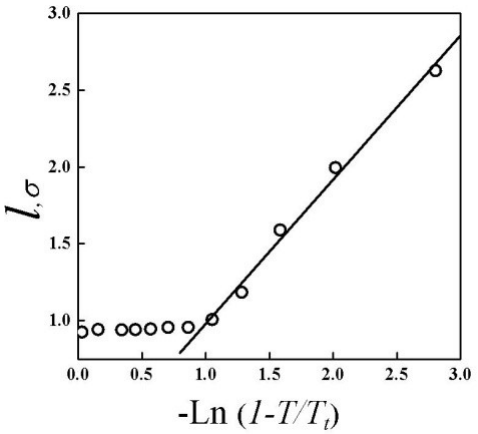


Рисунок. Температурная зависимость толщины квазижидкостного слоя при ориентации (111), точками отмечены результаты молекулярно-динамических расчетов, сплошная линия – линейная аппроксимация результатов вблизи тройной точки.

Работа выполнена при поддержке Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-6) и РФФИ (проект № 15-08-03399).

Литература

1. Mei Q. S., Lu K. // Prog. Mat. Sci. 2007. V.52. P. 1175-1262.
2. Baidakov V.G., Protsenko S.P., Kozlova Z.R. // Fluid Phase Equilib. 2011. V.305. P. 106-113.

ЗАКРУЧЕННАЯ СТРУЯ ПЕРЕГРЕТОЙ ЖИДКОСТИ В УСЛОВИЯХ ИНТЕНСИВНЫХ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Решетников А.В.,* Бусов К.А., Мажейко Н.А., Коверда В.П.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: reshav@itp.uran.ru

Актуальность исследования критических режимов истечения и взрывного вскипания в потоках перегретой жидкости связана с запросами атомной энергетики, криогенной техники, с проблемой безопасности элементов энергетического оборудования. Важность исследования закрученных потоков вскипающей жидкости определяется широкой сферой применения закрутки потока в различных отраслях техники: теплообменники, горение в двигателях и т. д. Более того, многие аспекты генерации и динамики вихревых структур все еще остаются не до конца изученными. Также отсутствуют общепризнанные теории, описывающие физические механизмы ряда явлений, таких как, например, закономерности поведения вихревых структур в условиях интенсивных фазовых переходов.

Истечение исследуемой среды производилось из рабочей камеры, представляющей собой цилиндрический стакан объемом около 1 л. Камера позволяла нагревать жидкость в ней от комнатной температуры до 570 К и создавать давление до 10 МПа. Закрутка потока в камере осуществлялась вращающимся лопаточным завихрителем. Истечение вскипающей жидкости производилось через короткий цилиндрический канал. В качестве рабочей жидкости использовалась вода. Начальные параметры жидкости (температура и давление) в рабочей камере соответствовали линии насыщения и изобаре 4 МПа.

В опытах установлено, что при малых перегревах (до 70 К) в условиях вскипания на отдельных невзаимодействующих центрах кипения воздействие закрутки приводит к увеличению угла раскрытия струи примерно в два раза. Причем, чем ниже температура струи, тем больше это увеличение, а струя при закрутке становится более мелкодисперсной. С ростом перегревов в струе и включением в действие механизма интенсивного гетерогенного парообразования закрутка уменьшает угол раскрытия струи и препятствует ее полному развалу при тех температурах, при которых в отсутствии закрутки полный развал струи имел место. В случае истечения жидкости при начальных параметрах, соответствующих линии насыщения, и высоких скоростях закрутки радиальные градиенты в струе приводят к нуклеации внутри канала и полного развала струи вообще не наблюдалось. Найдены условия генерации $1/f$-флуктуаций в закрученной струе вскипающей жидкости.

Можно заключить, что закрутка потока позволяет управлять как формой вскипающей струи при различных перегревах, так и степенью дисперсности двухфазной струи.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект № 15-08-02210а) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

ТЕПЛОПЕРЕНОС В СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ФЛЮИДАХ В МАСШТАБЕ МАЛЫХ ХАРАКТЕРНЫХ ВРЕМЕН И РАЗМЕРОВ

Рютин С.Б.,* Скрипов П.В.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: ryutin.sergey@gmail.com

Исследование теплопереноса в сверхкритических флюидах (СКФ) привлекает внимание широкого круга исследователей в течение более полувека. Основных причин этого интереса две. Во-первых, теплообмен вблизи критической точки (КТ) осложнен экстремальным поведением теплофизических свойств СКФ, что представляет несомненный фундаментальный интерес. Во-вторых, результаты таких исследований востребованы теплоэнергетикой, поскольку применение теплоносителей при сверхкритических параметрах позволяет существенно повысить термический к.п.д. оборудования.

С удовольствием отметим, что одно из первых в мире экспериментальных исследований свободно конвективного теплообмена на проволочном зонде было инициировано и выполнено В.П. Скриповым [1], в то время еще только будущим академиком и создателем нашего института (ИТФ УрО РАН). Отметим, что практически одновременно советскими исследователями были начаты работы по исследованию вынужденно конвективного теплообмена, из чего можно сделать вывод, что выполненные в то время работы, несомненно, находились в авангарде исследований явлений переноса в СКФ.

Отметим, что все экспериментальные работы по изучению свободно и вынужденно конвективного теплообмена были выполнены в квазистационарных режимах, на результаты которых оказывает существенное влияние особая конвективная неустойчивость СКФ, проявляющаяся тем сильнее, чем ближе состояние вещества к КТ. Это обстоятельство было подмечено В.П. Скриповым: «Главная экспериментальная трудность состоит в подавлении или учете конвективного теплообмена, который очень легко возникает около критической точки…» [2].

В докладе будут представлены результаты экспериментального изучения теплообмена в СКФ с применением методик управляемого импульсного нагрева проволочного зонда. Сочетание относительно малых времён нагрева и мощного теплового воздействия позволило практически пренебречь влиянием конвекции и наблюдать изменение картин теплообмена в зависимости от изменения внешнего давления [3,4].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 16-08-00381) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 15-20-2-18).

Литература

1. Скрипов В.П., Поташев П.И. // Инженерно-физический журнал. 1962. Т.5. № 2. С. 30-34.
2. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. М.: Наука. 1972.
3. Rutin S.B., Volosnikov D.V., Skripov P.V. // Int. J. Heat and Mass Trans. 2015. V.91. P. 1-6.
4. Rutin S.B., Skripov P.V. // J. Eng. Thermophys. 2016. V.25. P. 166-173.

ОПЫТ ПЕРЕГРЕВА РАСТВОРОВ: МАЛЫЕ ДОБАВКИ – БОЛЬШИЕ ЭФФЕКТЫ

Рютин С.Б., Скрипов П.В.*

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: 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.

Начиная с 50-х годов XX века накоплен определенный массив данных по кинетике спонтанного вскипания и связанному с ней достижимому перегреву чистых жидкостей. В силу ряда обстоятельств, переход к двухкомпонентным системам сопровождается существенным усложнением процедуры описания перегретых состояний. Расширение области двухфазных равновесий, в свою очередь, приводит к усилению требований к экспериментальным установкам и методикам, разработанным для чистых жидкостей. По-видимому, по этой причине перегрев растворов изучен значительно хуже. Пик исследований пришелся на середину 70-х годов, после выхода книги В.П. Скрипова на английском языке [1]. Отметим, что исследования явления перегрева в нашей теплофизической школе началось именно с изучения растворов [2].

Доклад посвящен изучению достижимого перегрева растворов при их импульсном нагреве [3,4]. Специфика исследования обусловлена разнообразием типов фазовых диаграмм, от полностью совместимых систем с непрерывной критической кривой до ограниченно совместимых систем с разомкнутой критической кривой, а также возможностью концентрационного пересыщения раствора. Появление двойной метастабильности требует учета взаимного расположения спинодалей (механической и диффузионной спинодали) на фазовой диаграмме системы. Выяснение влияния фактора диффузионной метастабильности, обладающего собственными характерными временами, на процесс спонтанного вскипания растворов с различной степенью совместимости компонентов является приоритетной задачей исследования. На примере систем полидиметилсилоксан / диоксид углерода и трансформаторное масло / вода будет обсужден факт существенного влияния малых добавок на поведение основного вещества в процессе его импульсного нагрева.

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

Литература

1. Скрипов В.П., Кукушкин В.И. // ЖФХ. 1961. Т.35. № 12. С. 2811-2813.
2. Skripov V.P. Metastable Liquids. New York: Halsted Press. 1974.
3. Скрипов П.В., Рютин С.Б., Бегишев В.П., Пучинскис С.Э., Бабушкин В.П. // Инженерно-физический журнал. 1992. Т.62. № 2. С. 276-283.
4. Rutin S.B., Galkin D.A., Skripov P.V. // Thermochimica Acta. 2017. V.651. P. 47-52.

СТОХАСТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС В КРИЗИСНЫХ РЕЖИМАХ КИПЕНИЯ

Скоков В.Н.,* Коверда В.П., Виноградов А.В., Решетников А.В.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: vnskokov@itp.uran.ru

В кризисных и переходных режимах тепломассопереноса с фазовыми превращениями могут возникать низкочастотные экстремальные пульсации со спектром мощности обратно пропорциональным частоте ($1/f$ спектр). В таких процессах происходит перекачка энергии от высокочастотных к низкочастотным модам и в системе возможны крупномасштабные экстремальные выбросы. Внешние воздействия приводят к усложнению процесса. Устойчивый результирующий процесс при таком усложнении определяется максимумом энтропии системы. При внешней периодической нагрузке в кризисных и переходных режимах, наряду с экстремальными пульсациями, имеющими $1/f$ спектр, возможен стохастический резонанс, при котором в присутствие шума происходит многократное усиление амплитуды периодического сигнала. В отличие от обычного резонанса в детерминированных системах, при стохастическом резонансе отсутствуют собственные резонансные частоты.

Наличие экстремальных температурных пульсаций с $1/f$ спектром установлено экспериментально при переходе от пузырькового к пленочному режиму кипения воды на проволочном нагревателе [1]. В настоящей работе приведены результаты экспериментального исследования экстремальных температурных пульсаций в окрестности кризиса кипения воды на платиновом проволочном нагревателе при периодическом джоулевом тепловыделении и внешнем шумовом воздействии [2]. Использовались различные источники внешнего шума: барботирующий воздух, дополнительные гетерогенные паровые центры, закрутка теплоносителя. В реальных устройствах с использованием кипящего теплоносителя роль внешнего шума могут осуществлять паровые пузыри, генерируемые при интенсивном кипении в больших объемах. Показано, что при низких частотах периодического воздействия внешний шум приводит к перемежаемости режимов пузырькового и пленочного кипения и росту амплитуды температурных пульсаций. Определена зависимость мощности пульсаций от интенсивности внешнего шумового воздействия. Такая зависимость имеет немонотонный вид. Результаты интерпретируются как стохастический резонансный отклик системы, когда амплитуда периодических пульсаций возрастает в присутствии шума.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проект № 15-08-02210а) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

Литература

1. Коверда В.П., Скоков В.Н., Виноградов А.В. // ТВТ. 2013. Т.51. № 3. С. 471-476.
2. Скоков В.Н., Виноградов А.В., Решетников А.В., Коверда В.П. // ТВТ. 2016. Т.54. № 3. С. 366-370.

ВЕЛИЧИНА ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА ПРИ ОБРАЗОВАНИИ ЗАРОДЫША КРИТИЧЕСКОГО РАЗМЕРА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ СТЕКЛО–КРИСТАЛЛ В СТЕКЛАХ ЛИТИЕВОСИЛИКАТНОЙ СИСТЕМЫ

Сычева Г.А.*

Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: sycheva_galina@mail.ru

Возникновение в стекле сферического кристалла с радиусом r сопровождается изменением свободной энергии системы. Существуют две причины изменения свободной энергии: 1. Образование границы или поверхности между зародышем и маточной фазой, благодаря чему свободная энергия возрастает на величину новой поверхностной энергии; 2. Более упорядоченное расположение атомов в зародыше, чем в окружающей фазе, что должно уменьшить свободную энергию системы. Это два противоборствующих фактора, от них зависит результирующее изменение свободной энергии. Соотношение $r^*=2\sigma/\Delta\varphi$ выражает условие равновесия зародыша с окружающей средой. Это равновесие неустойчивое. Уменьшение размера зародыша ведет к уменьшению потенциала системы, и потому зародыши меньше r^* стремятся распадаться на мономеры. Если зародыш достиг размера, превосходящего критический, то его дальнейшее увеличение снижает энергию системы, и поэтому такие агрегаты растут. Они и будут зародышами новой фазы. Для образования критического зародыша система должна преодолеть потенциальный барьер высотой $\Phi^* = 16\pi\sigma^3/3(\Delta\varphi)^2$. Его можно рассчитать, если для стекла данного состава известны поверхностная энергия σ [1] и разность свободных энергий стекла и кристалла $\Delta\varphi$ [2,3].

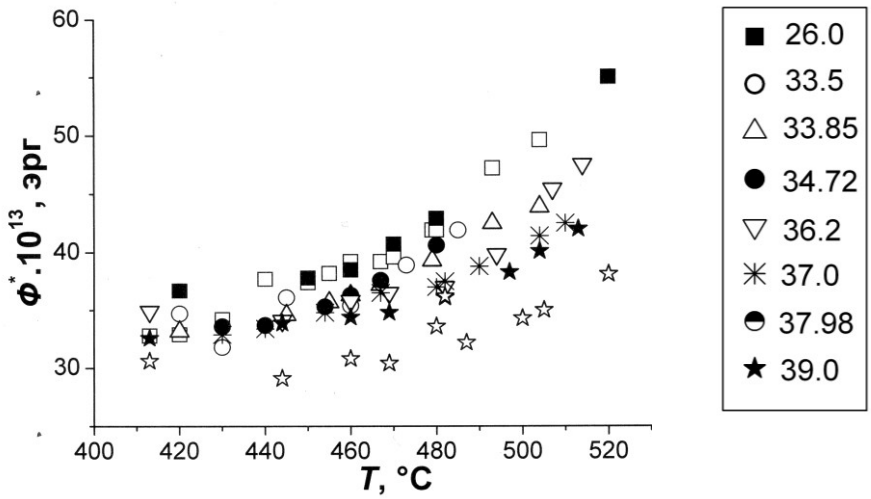


Рисунок. Зависимости Φ^* от температуры для стекол, близких по составу к дисиликату лития. Содержание Li_2O для различных стекол указано на вставке к рисунку.

Литература

1. Сычева Г.А. // Физика и химия стекла. 1998. Т.24. № 4. С. 491-498.
2. Takahashi K., Yoshio T. // J. Ceramic Soc. Japan. 1973. V.81. № 12. P. 524-533.
3. Сычева Г.А. // Физика и химия стекла. 2015. Т.41. № 3. С. 405-410.

НУКЛЕАЦИЯ НА ЧАСТИЧНО СМАЧИВАЕМОЙ ПОВЕРХНОСТИ: МОДЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ И ЭФФЕКТЫ ЛИНЕЙНОГО НАТЯЖЕНИЯ И АДСОРБЦИИ

Татьяненко Д.В.,* Щёкин А.К.

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: d.tatyanenko@spbu.ru

Для нахождения формы и работы образования зародышей новой фазы при конденсации пересыщенного однокомпонентного пара на частично смачиваемой подложке применен модельный функционал [1] большого термодинамического потенциала от профиля локальной толщины $l(\mathbf{x})$ смачивающей пленки:

$$\Omega^{(\mathrm{ID})}\left[l(\mathbf{x})\right]=\int d^2\mathbf{x}\left[-n^{\alpha}\Delta\mu\, l(\mathbf{x})+\sigma_0^{\alpha\gamma}+\sigma_0^{\alpha\beta}\sqrt{1+\left(\nabla l(\mathbf{x})\right)^2}+U\left(l(\mathbf{x})\right)\right], \qquad (1)$$

где n^{α} – плотность числа молекул в конденсате, $\Delta\mu$ – отклонение химического потенциала молекул пара/конденсата от значения на бинодали, $\sigma_0^{\alpha\gamma}$ и $\sigma_0^{\alpha\beta}$ – поверхностные натяжения подложка–жидкость и жидкость–пар при $\Delta\mu=0$. Вклад межповерхностного потенциала $U(h)=\int_h^{\infty}\Pi(h')\,d\,h'$, выражаемого через изотерму расклинивающего давления $\Pi(h)$, специфичен для тонких пленок.

Для типичных при частичном смачивании форм $U(h)$ обнаруживаются два стационарных профиля толщины пленки для функционала (1): тривиальный $l(\mathbf{x})=f$: $\Pi(f)=-n^{\alpha}\Delta\mu$ (метастабильная пленка на поверхности) и нетривиальный в виде мениска, переходящего по краям в пленку той же толщины f (критический зародыш). При $\Delta\mu\to+0$ мениск в верхней части близок к сферическому сегменту. Это воспроизводит другое популярное «макроскопическое» описание сидячих капель на основе формулы Лапласа и краевого угла из обобщенного соотношения Юнга [2]

$$\sigma_0^{\alpha\beta}\cos\theta=\sigma_0^{\beta\gamma}-\sigma_0^{\alpha\gamma}-\kappa_0/r, \qquad (2)$$

в которое входят значения поверхностных натяжений σ, а также линейного натяжения κ линии трехфазного контакта (радиуса r) при текущем значении μ.

Анализ результатов и сравнение с результатами теории [3], использующей описание сидячих капель на основе формулы Лапласа и уравнения (2), показывают, что для правильного количественного и качественного описания термодинамики нуклеации необходимо учитывать размерную зависимость линейного натяжения $\kappa(r,\mu)$ и зависимость поверхностного натяжения $\sigma^{\beta\gamma}(\mu)$, т.е. эффект адсорбции/смачивания свободной поверхности подложки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-03-01140-а).

Литература

1. Dobbs H.T., Indekeu J.O. // Physica A. 1993. V.201. P. 457-481.
2. Rusanov A.I., Shchekin A.K., Tatyanenko D.V. // Colloids Surf. A. 2004. V.250. P. 263-268.
3. Navascués G., Tarazona P. // J. Chem. Phys. 1981. V.75. P. 2441-2446.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В СПЛАВЕ Bi-Pb-Sn-Cd

Тикина И.В.,[1] Барбин Н.М.,*[1,2] Терентьев Д.И.,[1] Алексеев С.Г.[1]

[1]*Уральский институт ГПС МЧС России, Екатеринбург, Россия*

[2]*Уральский государственный аграрный университет, Екатеринбург, Россия*

*e-mail: NMBarbin@mail.ru

Компьютерное моделирование заключается в термодинамическом анализе равновесного состояния системы в целом. Наиболее эффективной программой, реализующей термодинамические расчеты, является программный комплекс TERRA [1]. Расплав Bi-Pb-Sn-Cd представлен моделью идеальных растворов продуктов взаимодействия [2], в состав которого входят конденсированные Bi, Pb, Sn, Cd, а также двойные и тройные металлиды. В составе газовой фазы учтены пары Pb, Bi, Cd, Sn, Pb_2, Bi_2, Bi_3, Bi_4, Sn_2, Cd_2, электронный газ, ионизированные пары свинца, висмута, кадмия и олова. Термодинамические функции индивидуальных веществ взяты из баз данных ИВТАНТЕРМО, TERRA, ASTRA, HSC Chemistry. Термодинамические функции двойных и тройных металлидов, отсутствующие в базах данных, взяты из работы [3].

На рисунке представлена температурная зависимость равновесного содержания основных паровых компонентов в системе Bi(42,0%)+Pb(40,6%)+Sn(10,0%)+Cd(7,4%) (в масс.%) в атмосфере Ar при p = 10^{-3} атм.

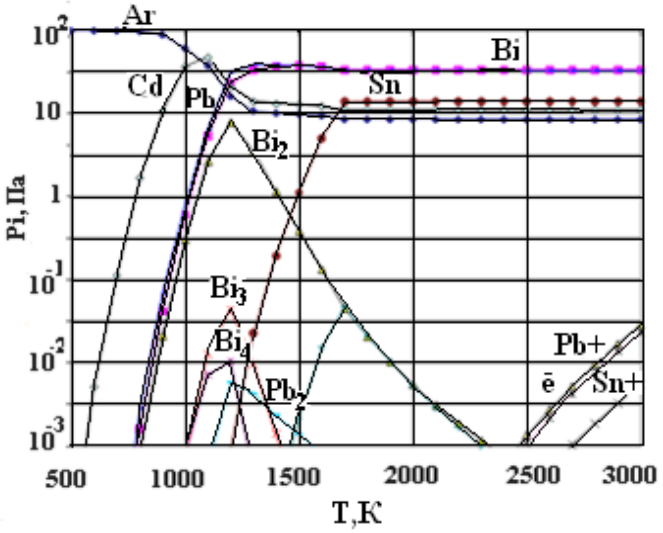


Рисунок. Температурная зависимость равновесного содержания основных паровых компонентов в системе Bi(42,0%)+Pb(40,6%)+Sn(10,0%)+Cd(7,4%) (в масс.%) в атмосфере Ar при $p = 10^{-3}$ атм.

Литература

1. Моисеев Г.К., Вяткин Н.А., Барбин Н.М. Применение термодинамического моделирования для изучения взаимодействий с участием ионных расплавов. Челябинск: Из-во ЮУрГУ. 2002.

2. Барбин Н.М., Казанцев Г.Ф., Ватолин Н.А. Переработка вторичного свинцового сырья в ионных солевых расплавах. Екатеринбург: УрО РАН. 2002.

3. Овчинникова И.В., Терентьев Д.И., Алексеев С.Г., Барбин Н.М. // Расплавы. 2011. № 5. С. 83.

ПОВЕРХНОСТНАЯ СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ КРИСТАЛЛ-ПАР И ПОВЕРХНОСТНОЕ ПРЕДПЛАВЛЕНИЕ (молекулярно-динамическое моделирование)

Типеев А.О.,* Байдаков В.Г., Проценко К.Р.

Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия

*e-mail: tipeeff@yandex.ru

Поверхностная свободная энергия кристалл–пар σ является ключевым параметром, необходимым для описания физических явлений, происходящих на поверхности твердого тела, таких как адсорбция, смачивание, адгезия и др. Ввиду отсутствия методов прямого измерения σ актуальной задачей является её расчет методами компьютерного моделирования.

Молекулярно-динамические вычисления выполнены для равновесных двухфазных систем ГЦК кристалл–пар, содержащих от 54 000 до 108 000 леннард-джонсовских (ЛД) частиц с радиусом обрезания потенциала взаимодействия $r_c = 6.78d$. Расчеты проведены на плоскостях (100), (110) и (111) кристалла для 20 значений температуры в интервале от абсолютного нуля до температуры тройной точки $T_t = 0.692\varepsilon/k_B$.

Поверхностная энергия $\bar{u}$ определялась как разность внутренних энергий двухфазной системы и однородных кристаллической и паровой фаз. Поверхностное натяжение γ рассчитывалось согласно его механическому определению через нормальную и тангенциальную компоненты тензора давления. По полученным значениям $\bar{u}(T)$ и $\gamma(T)$ методом термодинамического интегрирования вдоль кривой сублимации найдена температурная зависимость поверхностной энтропии $\bar{s}$:

$$\left[\frac{d(\bar{s}\rho_s^{-2/3})}{dT}\right]_{coex} = \rho_s^{-2/3}\left(\frac{1}{T}\left[\frac{d\bar{u}}{dT}\right]_{coex} - \frac{2}{3\rho_s}\frac{\bar{u}-\gamma}{T}\left[\frac{d\rho_s}{dT}\right]_{coex}\right),$$

где ρ_s – плотность кристалла. Постоянная интегрирования – значение $\bar{s}$ при T=0 – определена из классической динамической теории кристаллической решетки. Величина σ рассчитывалась по формуле $\sigma = \bar{u} - T\cdot\bar{s}$.

Установлено, что в исследуемом температурном интервале $\bar{u}(T)$ и $\bar{s}(T)$ – возрастающие функции, а величина γ принимает как положительные, так и отрицательные значения. Поверхностная свободная энергия монотонно убывает с температурой, причем $\sigma_{110} > \sigma_{100} > \sigma_{111}$. Аналогичные неравенства справедливы для $\bar{u}$ и $\bar{s}$, при этом анизотропия величин не превышает 10 %.

Обнаружено резкое изменение характера зависимостей $\bar{u}(T)$, $\bar{s}(T)$, $\sigma(T)$ вблизи температуры конечной точки линии плавления ЛД системы $T_K = 0.529\varepsilon/k_B$, обусловленное поверхностным предплавлением. Рассчитана температурная зависимость толщины квазижидкого поверхностного слоя l. Вблизи тройной точки справедливо $l(T) \sim \quad -T/T_t)$.

Молекулярно-динамические вычисления проведены в программе LAMMPS на суперкомпьютере Института математики и механики УрО РАН.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 14-19-00567).

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ВОДНО-ГАЗОВОЙ СМЕСИ В СВЕРХЗВУКОВЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКАХ ВОДЫ И ЭТАНА

Томин А.С.,* Виноградов А.В., Файзуллин М.З., Коверда В.П.
Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: andrey.itf.2017@yandex.ru

Образцы кристаллической водно-этановой смеси получали в стеклянной вакуумной камере, имеющей сферическую форму, осаждением сверхзвуковых молекулярных пучков разреженного пара и этана на охлаждаемые жидким азотом стенки камеры. Пар и газ поступали в вакуумную камеру через сопла Лаваля, которые разгоняли молекулярные пучки до сверхзвуковой скорости. Расположение выходных отверстий сопел обеспечивало перекрытие пучков в объеме камеры. Адиабатическое расширение пучков пара и газа на выходе из сопел приводило к понижению температуры и образованию кристаллической фазы в молекулярном потоке водно-газовой смеси.

В камере поддерживался вакуум не хуже 10^{-2} мм рт. ст. Резервуар с водой и газовый баллон размещались за пределами вакуумной камеры. В опытах использовалась дважды дистиллированная вода. Чистота этана составляла 99.75 объемных %. Изменением температуры в резервуаре изменяли соотношение расходов газа и пара и производительность процесса осаждения водно-газовой смеси. Температура образца, осажденного на стенки камеры, измерялась медь-константановой термопарой. Погрешность измерения температуры не превышала ±0.5 К.

В опытах наблюдали выделение газа из образца при его нагревании в диапазоне 77-273 К, а также зависимость выделения газа от времени при фиксированных температурах. В температурном диапазоне 77-273 К выделения газа не наблюдалось как при нагревании с постоянной скоростью, так и при фиксированных температурах. Самоконсервация обеспечивала сохранение кристаллического состояния водно-газовой смеси при температурах значительно выше равновесной температуры сублимации этана. При ~273 К наблюдали плавление и разложение образца с интенсивным выделением газа. Образцы, полученные при максимально достигнутой производительности процесса осаждения, содержали более 50 масс.% газа. Это означает, что единичный объем образовавшейся при осаждении кристаллической водно-газовой смеси содержал свыше 1000 объемов газообразного этана.

Результаты исследования представляют интерес в связи с разработкой экономичных и безопасных технологий хранения и транспорта природного газа.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 15-08-02734-а) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

ЭВОЛЮЦИЯ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛАСТЕРОВ ПО РАЗМЕРАМ В ПОЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ ФУЛЛЕРЕНА C_{60}

Тропин Т.В.,*[1] Жаргалан Н.,[1] Авдеев М.В.,[1,2] Аксенов В.Л.[1,2]

[1]*Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

[2]*Петербургский институт ядерной физики, НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

*e-mail: ttv@.jinr.ru

Растворы фуллеренов C_{60}, новой аллотропной формы углерода, открытой в конце прошлого столетия, вызывают большой интерес исследователей, в том числе благодаря своим потенциальным применениям, а также ряду интересных явлений, обнаруженных в этих системах [1]. К этим явлениям относятся образование и рост кластеров, сольватохромизм и другие.

Настоящая работа посвящена развитию теоретических методов описания кинетики кластерообразования в полярных растворах фуллерена. В этих растворах наблюдается медленный рост крупных устойчивых агрегатов C_{60} [2], который, как предполагают исследователи, непосредственно связан с образованием в растворе комплексов C_{60}-растворитель [3]. Рассматриваются экспериментальные данные по растворам C_{60} в N-метилпирролидоне (NMП), как наиболее изученной системе. Для описания эволюции кластерного состояния применяется подход, основанный на решении системы кинетических уравнений теории нуклеации для функции распределения кластеров по размерам в растворе. С использованием развитых ранее моделей, получено решение данных уравнений на полном временном интервале эволюции модельной системы. Полученные решения используются для расчета экспериментальных данных.

Несколько лет назад было обнаружено, что при разбавлении водой, происходит изменение кластерного состояния фуллеренов в полярном растворителе. Именно, при превышении объемной доли добавляемой воды некоторого критического порога, размеры кластеров уменьшаются в несколько раз. В работе обсуждаются модели данного явления, представлены результаты первых расчетов эволюции функций распределения при разбавлении для данной системы.

Литература

1. Авдеев М.В., Аксенов В.Л., Тропин Т.В. // ЖФХ. 2010. Т.84. С. 1405-1416.
2. Tropin T.V., Jargalan N., Avdeev M.V., Kyzyma O.A., Eremin R.A., Sangaa D. et al. // J. Mol. Liq. 2012 .V.175. P. 4-11.3.
3. Kyzyma O. A., Korobov M.V., Avdeev M.V., Garamus V.M., Snegir S.V. et al. // Chem. Phys. Lett. 2010. V.493. P. 103-106.

ФАЗОВАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ СЛОЕВ АМОРФНОГО ЛЬДА В ПРИСУТСТВИИ ИСКУССТВЕННО ВНЕСЕННЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЦЕНТРОВ

Файзуллин М.З.,* Виноградов А.В., Томин А.С., Коверда В.П.
Институт теплофизикиУрО РАН, Екатеринбург, Россия
*e-mail: faizullin@itp.uran.ru

Слои аморфного льда получали осаждением сверхзвуковых молекулярных пучков разреженного пара на охлажденную жидким азотом подложку. Молекулярный пучок поступал в вакуумную камеру через сопло Лаваля, которое разгоняло его до сверхзвуковой скорости. Адиабатическое расширение молекулярного потока приводит к понижению температуры на выходе из сопла и образованию кристаллических нанокластеров воды кубической алмазоподобной структуры. Размер кластеров зависит от давления на входе в сопло. Чем выше давление, тем больше размер кластеров и, следовательно, доля кристаллической фазы в объеме образца. При нагревании неравновесных конденсатов наблюдали стеклование (размягчение) и последующую спонтанную кристаллизацию. Присутствие искусственно внесенных в неравновесные конденсаты кристалликов воды обеспечивало условия для возникновения «горячих» центров и переход к взрывному режиму кристаллизации в аморфной среде.

Опыты со слоями аморфного льда в присутствии готовых центров кристаллизации демонстрируют неустойчивость неравновесной системы к локальному тепловому воздействию. Критическое тепловое возмущение может возникнуть в системе спонтанно в скоплении центров кристаллизации. Вероятность такого события возрастает с увеличением размеров системы. В серии проведенных опытов со слоями аморфного льда, приготовленными сверхзвуковой конденсацией, на ДТА термограммах наблюдалось не менее трех экзотермических сигналов с высокой воспроизводимостью положения первого пика при 141 К и последнего при 156-158 К. Это указывает на развитие кристаллизации из разных «горячих» центров и случайный характер их распределения в объеме аморфной среды. Увеличение числа центров кристаллизации происходит при увеличении доли кристаллической фазы в образце, которое достигалось как повышением давления на входе в сверхзвуковое сопло, так и при увеличении толщины образца. Однако существенного влияния давления, как и толщины конденсатов, на характер взрывной кристаллизации и на значения температур стеклования и окончания кристаллизации не обнаружено.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 15-08-02734-а) и Комплексной программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 15-1-2-7).

О ГРАНИЦАХ ДОСТИЖИМЫХ СОСТОЯНИЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ В ЖИДКОСТИ И ГАЗЕ ПРИ ИЗОЭНТРОПИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Хищенко К.В.*

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

*e-mail: konst@ihed.ras.ru

Развитие источников интенсивного импульсного воздействия на вещество создает возможности получения состояний вещества при экстремально высоких температурах и давлениях. В настоящей работе рассматриваются эффекты фазовых превращений вещества в ударных волнах сжатия и разгрузки, а также в волнах изоэнтропического сжатия и расширения. Особое внимание уделяется определению границ достижимости термодинамического равновесия жидкой и газовой фаз в условиях постоянства энтропии. При этом состояния равновесия могут быть получены, если $(\partial P/\partial V)_S < 0$ [1-3]. Даются примеры расчетов термодинамических параметров металлов на энтропийной спинодали $(\partial P/\partial V)_S = 0$ в широком диапазоне температур, плотностей, энтропий и давлений.

Литература

1. Зельдович Я.Б., Тодес О.М. // ЖЭТФ. 1942. Т.10. № 12. С. 1441-1445.
2. Фортов В.Е., Леонтьев А.А. // ТВТ. 1976. Т.14. № 4. С. 711-717.
3. Байдаков В.Г., Скрипов В.П. // Теплофизика метастабильных систем. Свердловск: УНЦ АН СССР. 1977.

ВЯЗКОСТНЫЕ И АКУСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В РАСПЛАВЕ КОБАЛЬТА: ТЕОРИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

Хуснутдинов Р.М.,*[1,2] Мокшин А.В.[1,2]

[1]*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*

[2]*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, Россия*

*e-mail: khrm@mail.ru

Представлены результаты теоретического и экспериментального исследования атомарной динамики расплава кобальта в температурном диапазоне T = [1400; 2000] K при давлении p = 1.5 бар. Получены теоретические выражения для спектральной плотности временной корреляционной функции тензора напряжений и кинематической вязкости, определяемые через частотные и термодинамические параметры системы.

Найдены температурные зависимости кинематической вязкости для расплава кобальта двумя независимыми методами: (1) численно, на основе данных моделирования атомарной динамики с помощью анализа временных корреляционных функций поперечного потока в рамках обобщенной гидродинамики и с помощью интегрального соотношения Кубо-Грина, а также (2) теоретически, в рамках формализма функций памяти Цванцига-Мори с помощью самосогласованного подхода. Установлено хорошее согласие результатов теоретических расчетов для температурной зависимости кинематической вязкости расплава кобальта с экспериментальными данными и результатами моделирования атомарной динамики.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты были выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МД-5792.2016.2.

СПОНТАННАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ РАСПЛАВОВ ПРИ БОЛЬШИХ ОТКЛОНЕНИЯХ ОТ РАВНОВЕСИЯ

Чернов А.А.,* Пильник А.А.
Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия
*e-mail: chernov@itp.nsc.ru

Решена задача об объемной кристаллизации малого объема металлического расплава, быстро приведенного в глубокое переохлажденное состояние, когда гомогенные механизмы нуклеации центров кристаллизации заведомо превалируют над гетерогенными. Задача решалась на основе сформулированной универсальной кинетической модели суммарного превращения, которая корректно учитывает изменение степени метастабильности материнской фазы в процессе зарождения и роста центров новой фазы [1]. Рассматривается случай как мгновенного (при бесконечно быстром охлаждении расплава до заданной температуры), так и постепенного (при конечной скорости охлаждения расплава) создания переохлажденного состояния. Отличительной особенностью предложенной модели является выделение в объеме кристаллизующегося вещества «запрещенных» зон, нуклеация новых зародышей в которых подавлена (что обусловлено формированием вокруг кристаллов в процессе их роста прогретых областей, частота нуклеации в которых значительно меньше, чем вдали от них). Суммарная динамика трансформации этих областей позволяет найти как время нуклеации, что само по себе является нетривиальной задачей, так и конечное число образующихся центров кристаллизации, что в значительной степени определяет морфологию затвердевшего материала.

Построена замкнутая система интегро-дифференциальных уравнений, полностью описывающая кинетику рассматриваемого процесса и позволяющая найти скорость образования новых центров кристаллизации, а также зависимость доли кристаллической фазы от времени. Для описания кинетики роста одиночных кристаллов использовалось полученное оригинальное аналитическое решение [2], которое справедливо в широком диапазоне переохлаждений (в том числе и в сильно неравновесных условиях) и принципиально отличающееся от известных квазистационарных, которые, как показано, справедливы лишь при очень больших значениях числа Кутателадзе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 15-08-04474).

Литература

1. Chernov A.A., Pil'nik A.A., Islamov D.R. // J. Crystal Growth. 2016. V.450. P. 45-49.
2. Chernov A.A., Pil'nik A.A. // JETP Letters. 2015. V.102. № 8. P. 526-529.

ДИНАМИКА МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ В АНСАМБЛЕ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ, ЭВОЛЮЦИОНИРУЮЩИХ ПОД ВЛИЯНИЕМ ШУМА

Четвериков А.П.,* Сергеев К.С.
СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия
*e-mail: chetverikovap@info.sgu.ru

Исследуется динамика одномерного ансамбля активных броуновских частиц, взаимодействующих посредством потенциальных сил Морзе.

Показано, что в ансамбле малой плотности формируются многокластерные конфигурации с упорядоченным взаимодействием кластеров. С увеличением температуры такие состояния претерпевают «фазовые переходы».

В плотном ансамбле частицы не имеют возможность группироваться в кластеры, но в ансамбле возбуждается одна из пространственных мод, тип которой определяется выбором начальных условий [1-3].

Стационарные моды (аттракторы) цепочки с периодическими граничными условиями представляют собой кноидальные волны [4,5]. Для них характерно равномерное распределение максимумов плотности частиц на длине цепочки. Однако при старте со случайных начальных условий сначала возникает метастабильное состояние с неравномерным распределением максимумов плотности; переходу к стационарной моде соответствует длительный переходный процесс.

В работе методами численного моделирования исследуются характеристики метастабильных состояний, закономерности и вероятности их возникновения, оцениваются времена жизни, в том числе в присутствии шума.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 16-12-10175).

Литература

1. Makarov V.A., E. del Rio, Ebeling W., Velarde M.G. // Phys. Rev. E. 2001. V.64. 366011.
2. Ebeling W., Landa P.S., Ushakov V.G. // Phys. Rev. E. 2001. V.63. 466011.
3. Velarde M.G. // Int. J. Quant. Chem. (Special Issue). 2004. V.98. P. 272-280.
4. Кернер В.С., Осипов В.В. Автосолитоны. М.: Наука. 1991.

ЛАЗЕРОИНДУЦИРОВАННОЕ КИПЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ В МЕДИЦИНСКИХ ПРИЛОЖЕНИЯХ

Чудновский В.М.,*[1] Юсупов В.И.,[1] Невожай В.И.,[2] Жуков С.А.,[2] Пахалюк Ю.П.[1]

[1]Тихоокеанский океанологический институт им. В.И. Ильичева ДВО РАН, Владивосток, Россия

[2]Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН, Москва, Россия

*e-mail: vm53@mail.ru

Биологические жидкости составляют в зависимости от возраста от 50 до 85 % массовой доли человеческого организма и представляют собой различные водные растворы. Существуют органы – прежде всего это полые органы, в полостях которых концентрация жидкости достигает 100 %. Среди патологических образований, которые требуют хирургического вмешательства, к таковым относятся кисты, патологически изменённые вены, заполненные кровью, свищи, экссудаты, транссудаты и другие. В работе исследована в эксперименте и клинике возможность теплового разрушения патологических образований посредством лазероиндуцированного кипения входящих в их состав биологических жидкостей. Кипение биологической жидкости – водного раствора с температурой насыщения ~100 ^{0}C в процессе конвективной теплоотдачи на стенки будет приводить к разогреву и необратимой денатурации белков, входящих в состав оболочек патологических образований и тем самым приводить их к тепловому разрушению. С применением оптических и акустических методов изучены тепловые и транспортные процессы, вызванные кипением биологических жидкостей под действием непрерывного лазерного излучения ближнего ИК диапазона (0.97-1.94 мкм) умеренной мощности (1-10 Вт), доставляемого с помощью оптического волокна. Эти процессы исследованы в ходе нескольких конкретных клинических процедур, направленных на модификацию и удаление патологических образований (вены, кисты молочной железы, кисты Беккера) и регенерацию тканей (межпозвонковые диски). В предлагаемом подходе модификация и разрушение биотканей происходят не путем их прямого лазерного нагрева, а за счет быстрой доставки тепла двухфазными струйными потоками, формируемыми при кипении жидкости. Это обеспечивает одновременно высокую скорость доставки тепла к патологической биоткани, исключает ее перегрев выше температуры 120 ^{0}C, а также нежелательный нагрев близлежащих тканей. Выявлено два основных режима лазероиндуцированного кипения вблизи торца волокна – гетерогенное струйное кипение (возникающее при чернении торца волокна) и гомогенное кипение (при поглощении излучения в объеме жидкости). Оба исследованных режима позволяют получать высокие значения удельного теплового потока, а доминирование того или иного режима кипения определяется наличием поглощающего покрытия на торце волокна, типом ткани, а также ее формой (например, существованием в ткани полостей или каналов).

ФОРМИРОВАНИЕ САМОПОДОБНЫХ ДЕНДРИТНЫХ МИКРО-И НАНОДОМЕННЫХ СТРУКТУР В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ

Шур В.Я.,* Ахматханов А.Р.
УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
*e-mail: vladimir_shur@urfu.ru

Исследовано самоорганизованное формирование дендритных микро- и нанодоменных структур при переключении поляризации в монокристаллах одноосных сегнетоэлектриков с диэлектрическим поверхностным слоем, а также в результате импульсного нагрева/охлаждения. Для объяснения использована аналогия между движением доменных стенок и перемещением фазовых границ [1].

Экспериментально исследовалось переключение поляризации при повышенных температурах в монокристаллических пластинах ниобата лития и танталата лития. Детально изучено формирование и рост дендритных доменов в форме снежинок (snowflakes) в однородном электрическом поле. Визуализация статической доменной структуры на поверхности производилась с высоким пространственным разрешением с помощью сканирующей электронной и сканирующей зондовой микроскопии. Кинетика роста доменов фиксировалась с высоким разрешением по времени с помощью оптической микроскопии. Форма доменов в объеме кристалла визуализировалась с помощью конфокальной микроскопии комбинационного рассеяния [2] и регистрации Черенковского излучения.

В танталате обнаружено формирование ансамблей нанодоменных снежинок после импульсного нагрева выше температуры фазового перехода [3,4] за счет обратного переключения в поверхностном слое растущих доменов.

Для описания полученных экспериментальных результатов использован оригинальный подход, основанный на аналогии между движением доменных стенок при переключении поляризации и фазовых границ при фазовых переходах первого рода. Предложенный подход впервые использован для моделирования топологической неустойчивости плоской доменной стенки при сильнонеравновесных условиях переключения поляризации. Справедливость модели подтверждена совпадением результатов компьютерного моделирования и эксперимента. Полученные результаты могут быть использованы для создания нового класса фотонных устройств [5].

Работа выполнена с использованием оборудования УЦКП «Современные нано-технологии» УрФУ за счет гранта Российского научного фонда (проект 14-12-00826).

Литература

1. Shur V.Ya. // J. Mat. Sci. 2006. V.41. P. 199-210.
2. Shur V.Ya., Zelenovskiy P.S. // J. Appl. Phys. 2014. V.116. 066802
3. Shur V.Ya., Kosobokov M.S., Mingaliev E.A., Kuznetsov D.K., Zelenovskiy P.S. // J. Appl. Phys. 2016. V.119. 144101.
4. Shur V.Ya., Kosobokov M.S., Mingaliev E.A. et al. // AIP Advances. 2015. V.5. 107110.
5. Shur V.Ya., Akhmatkhanov A.R., Baturin I.S. // Appl. Phys. Rev. 2015. V.2. 040604.

ТОНКАЯ СТРУКТУРА МЕДЛЕННОЙ МИЦЕЛЛЯРНОЙ РЕЛАКСАЦИИ

Щёкин А.К.,*[1] Аджемян Л.Ц.,[1] Бабинцев И.А.[1,2]

[1]*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

[2]*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Гатчина, Россия*

*e-mail: akshch@list.ru

Аналитическая теория молекулярного механизма медленной релаксации мицеллярных растворов за счет присоединения и испускания одиночных молекул поверхностно-активного вещества (ПАВ) опирается на континуальное приближение для системы линеаризованных разностных уравнений Беккера-Деринга в виде уравнения Фоккера-Планка [1-3]. Ранее в рамках этой теории было получено аналитическое выражение для времени медленной релаксации [1,3], которое оказалось в хорошем согласии с результатами численного расчета [4] в широком диапазоне концентраций ПАВ вблизи и существенно выше критической концентрации мицеллообразования (ККМ). Выражение для соответствующей медленной моды для распределения молекулярных агрегатов ПАВ по числам агрегации в аналитической теории ранее не обсуждалось. Тем не менее, поведение распределения агрегатов по числам агрегации в "мицеллярной области", лежащей на оси чисел агрегации между максимумом и минимумом работы агрегации, представляет существенный интерес, так как в этой области молекулярные агрегаты как раз и становятся мицеллами, так как относительно устойчивы и имеют достаточно большое время жизни.

В настоящей работе получено аналитическое выражение для ранее неизвестной тонкой структуры линеаризованной моды медленной мицеллярной релаксации в окрестности между максимумом и минимумом работы агрегации. Полученное выражение было использовано для уточнения тонкой структуры скоростей агрегации в разных точках той же окрестности между максимумом и минимумом работы агрегации, где скорости агрегации оказываются малыми, но демонстрирующими интересное немонотонное поведение [5]. Найденные аналитические соотношения для медленной моды и скоростей агрегации проверены с помощью численного решения системы линеаризованных разностных уравнений Беккера-Дёринга.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-13-00112).

Литература

1. Aniansson E.A.G. // Ber. Bunsen Ges. Phys. Chem. 1978. V.82. P. 981-988.
2. Shchekin A.K., Kuni F.M., Grinin A.P., Rusanov A.I. In: Nucleation Theory and Application. Ed. J.W.P. Schmelzer. New York: Wiley. 2005.
3. Русанов А.И., Щекин А.К. // Мицеллообразование в растворах поверхностно-активных веществ. С.-Петербург-Москва-Краснодар: Издательство Лань. 2016.
4. Babintsev I.A., Adzhemyan L.Ts., Shchekin A.K. // J. Chem. Phys. 2012. V.137. 044902.
5. Аджемян Л.Ц., Щекин А.К., Бабинцев И.А. // Коллоид. журн. 2017. Т.79. № 3. С. 237-244.

ПЛОТНОСТЬ СТЕКЛА В РАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЯХ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ НИЖЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СТЕКЛОВАНИЯ

Юрицын Н.С.*

Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: yuritsyn@gmail.com

При исследовании температурных зависимостей интенсивности рассеяния рентгеновских лучей под малыми углами и плотности стеклообразного B_2O_3, натриевоборатных и натриевоборосиликатных стекол в равновесных состояниях ниже температуры стеклования T_g был установлен переход переохлажденной жидкости при T_s в состояние, названное авторами твердым некристаллическим [1]. При $T < T_s$ структура переохлажденной жидкости переставала изменяться. Интервал $T_g - T_s$ не превышал 50 ^{0}C. Предполагалось, что такой переход характерен для всех стекол.

В настоящей работе проведены измерения плотности стекла состава $32MgO{\cdot}20Al_2O_3{\cdot}48B_2O_3$ (мол.%) при комнатной температуре методом гидростатического взвешивания в керосине после термообработок при температурах ниже T_g = 644 °C. Термообработки образцов проводились длительное время, необходимое для достижения равновесного значения плотности d_p при заданной температуре. На рис. *а*, показана плотность стекла от времени выдержки при 580 ^{0}C (на 64 ^{0}C ниже T_g). Равновесная плотность d_p была достигнута после длительной термообработки в течение t_p = 4300 ч.

Температурная зависимость $d_p(T)$ показывает (рис. *б*), что равновесная плотность стекла возрастает с уменьшением температуры. Это свидетельствует об изменении структуры образца во всем исследованном интервале температур от 644 до 580 ^{0}C. Таким образом, для переохлажденной стеклообразующей жидкости изученного состава не установлено существования температуры T_s, ниже которой ее структура перестает изменяться.

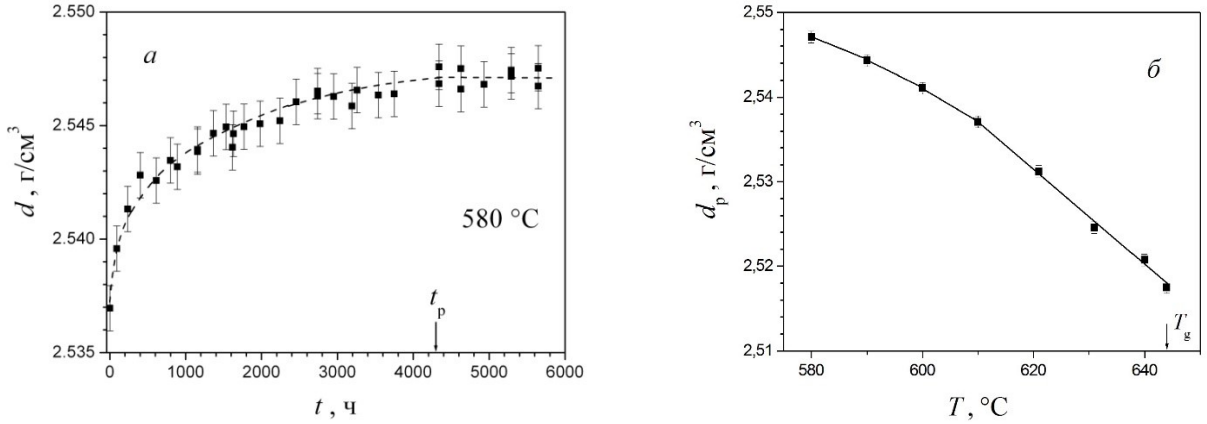


Рисунок. *а*) Зависимость плотности стекла от времени термообработки при температуре 580 °C. *б*) Зависимость равновесной плотности стекла d_p от температуры термообработки. Стекло состава $32MgO{\cdot}20Al_2O_3{\cdot}48B_2O_3$ (мол. %) по синтезу.

Литература

1. Голубков В.В., Онущенко П.А. // Физика и химия стекла. 2013. Т.39. № 1. С. 16-26.

ТЕПЛООБМЕН ПРИ ОХЛАЖДЕНИИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТЕЛ В НЕДОГРЕТОЙ ЖИДКОСТИ

Ягов В.В.,* Забиров А.Р., Кабаньков О.Н.
Национальный исследовательский университет «МЭИ», Москва, Россия
*e-mail: yagovvv@gmail.com

В докладе представлены результаты опытного исследования режимов охлаждения шаров из никеля, меди и нержавеющей стали в жидкостях, недогретых до температуры насыщения. Цель – выявление механизмов высокоинтенсивного теплообмена при пленочном кипении недогретой воды, впервые описанного в публикациях английских специалистов (Hewitt G.F., Kenning D.B.R. с сотрудниками, 1986-1990). В их экспериментах с медными сферами при температуре поверхности выше 500 ^{0}C и недогреве воды около 40 К зафиксированы тепловые потоки 5-6 МВт/м^2, что на порядок выше значений, типичных для пленочного кипения насыщенной жидкости. В отличие от всех известных исследований в этой области, в наших экспериментах температура охлаждаемого шара измерялась в нескольких точках его поверхности и в центре, что дало новую информацию о развитии процесса охлаждения при разных сочетаниях рода жидкости, металла и режимных параметров. Изучено влияние недогрева и давления на процесс охлаждения в четырех различных охлаждающих жидкостях.

Режим интенсивного теплообмена при пленочном кипении (названный английскими коллегами микропузырьковым кипением) обнаружен при охлаждении всех испытанных шаров в недогретой воде при давлениях 0.1-1.0 МПа при недогревах до насыщения более 20-30 К. При охлаждении в этаноле, изопропаноле и перфторгексане даже при огромных (до 170 К) недогревах до насыщения в подавляющем большинстве случаев паровая пленка сохраняла устойчивость, так что основное время охлаждения (до 3 минут) приходилось на режим устойчивого пленочного кипения с уровнем коэффициента теплоотдачи 200-600 Вт/м^{2}К. Только при охлаждении шара из нержавеющей стали диаметром 40 мм в этаноле с температурой –3 ^{0}C при давлении 0.9 МПа ($\Delta T_{sub} \approx$ 150К) получен участок интенсивного теплообмена при пленочном кипении (температура поверхности шара 312-200 ^{0}C, T_{cr} = 243.1 ^{0}C, $T_{lim} \approx$186 ^{0}C).

Обширный массив полученных опытных данных позволил построить качественную гипотезу об условиях возникновения и механизмах режима интенсивного теплообмена при пленочном кипении недогретой жидкости. Она объясняет, почему этот режим возникает при охлаждении высокотемпературных тел в воде и отсутствует в подавляющем большинстве исследованных опытов на неводных жидкостях. Доведение этой гипотезы до уровня приближенной количественной теории – задача дальнейших исследований.

Работа выполнена на кафедре инженерной теплофизики им. В.А. Кириллина НИУ «МЭИ» при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 17-79-20402).

СОДЕРЖАНИЕ

Abdulagatov I.M. Thermodynamic stability limit (spinodal) and isomorphic principle of critical phenomena in binary mixtures ……. 3

Gor G.Y. Fluctuations of number of particles in the fluid confined in a nanopore …… 4

Imre A.R., Groniewsky A., Györke G. Description of the metastable liquid region with quantic and quasi-quintic equation of states ……. 5

Hellmuth O., Feistel R., Schmelzer J., Shchekin A.K. Heterogeneous freezing of supercooled cloud droplets: What can be learned from semiempirical «ice contact angles»? …… 6

Suh D., Yasuoka K. Molecular dynamics simulations of thermal fluctuation of metastable liquids ……. 7

Schmelzer J.W.P. Kauzmann temperature, Kauzmann pressure, and the crystallization of glass-forming melts …….. 8

Абызов А.С., Фокин В.М., Юрицын Н.С., Родригес А.М., Шмельцер Ю. Концепция пространственной неоднородности в анализе нуклеации кристаллов в стеклообразующей жидкости ……. 9

Акашев А.А., Гурашкин А.Л. Измерение показателя преломления криогенных жидкостей с использованием оптоволоконного рефлектометра …… 10

Ахтямов Э.Р., Горбатов В.И., Полев В.Ф., Старостин А.А., Коршунов И.Г. Температуропроводность и электросопротивление метастабильного состояния в сплавах бинарной системы Ni-V ……. 11

Байдаков В.Г. Граница механической устойчивости твердого тела …….. 12

Байдаков В.Г., Проценко С.П., Брюханов В.М. Вскипание перегретой (растянутой) жидкости при ее контакте с плоской поверхностью твердого тела (молекулярно-динамическое моделирование) …… 13

Байдаков В.Г., Каверин А.М., Гришина К.А., Хотиенкова М.Н. Поверхностное натяжение газонасыщенных криогенных жидкостей …….. 14

Байдаков В.Г., Каверин А.М., Панков А.С. Кинетика спонтанного вскипания перегретых растворов криогенных жидкостей с полной взаимной растворимостью компонентов ……. 15

Булейко В.М., Григорьев Б.А., Израилев Н.Ю. Двойная метастабильность системы вода-углеводороды – предтеча гидратообразования …… 16

Бусов К.А., Решетников А.В., Мажейко Н.А. Влияние различных факторов на полный развал струи вскипающей жидкости …… 17

Ватолин Н.А., Белякова Р.М., Полухин В.А., Ригмант Л.К. Влияние водорода на полиморфизм и фазовые переходы в многокомпонентных сплавах железа при форсированных затвердеваниях расплавов ……. 18

Виноградов В.Е., Павлов П.А. Предельные растяжения жидкостей при импульсном обтекании острой кромки …… 19

Волосников Д.В., Поволоцкий И.И., Скрипов П.В. Тепловое сопротивление перегретых растворов изопрапонола ……. 20

Воронцов А.Г., Коренченко А.Е., Гельчинский Б.Р. Статистический анализ начальной стадии газофазной нуклеации металлического пара на основе МД моделирования ……... 21

Галашев А.Е., Воробьёв А.С. Устойчивость тонких пленок кремния, интеркалируемых литием, на серебре. Компьютерный эксперимент …….. 22

Галашев А.Е., Иваничкина К.А. Молекулярно-динамическое исследование неравновесных процессов интеркаляции–деинтеркаляции лития в силицене …… 23

Галашев А.Е., Рахманова О.Р. Молекулярно-динамическое изучение движения кислорода в расплавленном алюминии …….. 24

Галкин Д.А., Рютин С.Б., Скрипов П.В. Применение метода управляемого импульсного нагрева для измерения теплопроводности жидкостей …… 25

Гасанов Б.М. Экспериментальное исследование теплообмена при кипении воды и эмульсии н-пентан/вода в миниканале …… 26

Дзюба Ж.В., Удодов В.Н., Спирин Д.В. Метастабильные состояния на фазовых диаграммах 1D магнетика Изинга ……... 27

Ефремов В.П., Закатилова Е.И. Особенности процесса графитизации алмазов детонационного синтеза …….. 28

Иосилевский И.Л., Чигвинцев А.Ю., Ногинова А.Ю., Зорина И.Г. Спинодальный распад зоны метастабильного плавления в пределе нулевой температуры ……. 29

Иосилевский И.Л. Особенности структуры и свойств метастабильных состояний энтропийных фазовых переходов …… 30

Капитунов О.А., Решетников А.В., Мажейко Н.А., Бусов К.А. Форма струи вскипающей жидкости при истечении через каналы различной геометрии …… 31

Каплун А.Б., Мешалкин А.Б. О поведении изобарной теплоемкости при гипотетическом непрерывном фазовом переходе жидкость–газ …….. 32

Кирова Е.М., Писарев В.В. Вязкость расплава алюминия при стекловании по данным молекулярной динамики ……. 33

Коверда В.П., Скоков В.Н. Максимум энтропии в сложных системах с 1/f спектром мощности флуктуаций ……. 34

Корценштейн Н.М., Петров Л.В. Численное моделирование неравновесного фазового перехода пар-жидкость в многокомпонентных реагирующих системах ……. 34

Кузнецов В.В., Козулин И.А. Динамика распада метастабильной жидкости при высокой внешней и запасенной плотности энергии …….. 36

Кучма А.Е., Щёкин А.К., Есипова Н.Е., Татьяненко Д.В., Ицков С.В., Савин А.В. Стадии испарения микрокапли с большим краевым углом: теория и эксперимент ……. 37

Лебедева Т.С., Щёкин А.К. Учет размерно-зависимых эффектов при нуклеации на нейтральных и заряженных частицах в рамках метода функционала плотности ……. 38

Липнягов Е.В., Паршакова М.А. Визуализация спонтанного вскипания перегретого н-пентана в стеклянном капилляре ……. 39

Ломаев С.Л., Васильев Л.С. Термодинамическое описание неоднородных по составу метастабильных состояний твердого раствора при спинодальном распаде …… 40

Лончаков А.Т., Бобин С.Б., Дерюшкин В.В., Котов А.Н., Старостин А.А., Шангин В.В. Исследование кристаллов селенида ртути с примесями переходного металла термооптическим методом ……... 41

Лопаницына Н.Ю., Куксин А.Ю., Стариков С.В. Формирование структуры наночастиц золото-кремний: атомистическое моделирование …..... 42

Лукьянов К.В. Влияние давления на теплообмен при импульсном нагреве слабых растворов углеводородов с водой …….. 43

Лукьянов К.В., Смотрицкий А.А. Оценка температурных зависимостей теплопроводности и объемной теплоемкости полимерных материалов при импульсном нагреве …… 44

Мартюкова Д.С., Щёкин А.К., Кучма А.Е. Рост и растворение пузырьков газа в многокомпонентных растворах ……... 45

Мокшин А.В. Что мы можем узнать о процессах кристаллического зародышеобразования и роста на основе молекулярной динамики? …… 46

Наймарк О.Б. Метастабильные состояния и автомодельные закономерности развития неустойчивостей в конденсированных средах с дефектами ……. 47

Никитин Е.Д., Богатищева Н.С., Попов А.П., Файзуллин М.З. Теплофизические свойства компонентов биодизельного топлива и триглицеридов – сырья для его производства …….. 48

Норман Г.Э., Саитов И.М. Фазовая диаграмма водорода при высоких давлениях ……. 49

Норман Г.Э., Писарев В.В., Флейта Д.Ю. Коллективные эффекты и переход жидкость-стекло в переохлажденном расплаве чистого металла …… 49

Норман Г.Э., Саитов И.М. Природа перехода водорода в проводящее состояние при высоких давлениях …… 50

Павленко А.Н., Володин О.А., Печеркин Н.И., Суртаев А.С., Кузнецов Д.В. Теплообмен, переходные процессы и кризисные явления при кипении и испарении на микроструктурированных поверхностях при различных законах тепловыделения ……. 51

Павлов П.А. Динамика околокритического пузырька в метастабильной жидкости ……. 52

Пильник А.А., Чернов А.А., Давыдов М.Н. Рост газового пузырька в высоковязкой газонасыщенной жидкости при ее быстрой декомпрессии ……... 53

Писарев В.В. Фазовые диаграммы и метастабильные состояния двухкомпонентных флюидов …… 54

Поликарпов А.Ф. Тепломассоперенос в газе при фазовом переходе на плоской поверхности раздела жидкость-газ ……... 55

Полухин В.А., Курбанова Э.Д., Ригмант Л.К. Повышение метастабильности графен-металлических композитов гидрированием дефектов вращения и плавающих связей С-С ……. 56

Полухин В.А., Ригмант Л.К. Формирование среднего порядка как фактор термостабильности стекол PD-SI …….. 57

Проценко К.Р., Байдаков В.Г. Молекулярно-динамическое изучение структуры квазижидкостного слоя на поверхности кристалла при предплавлении …… 58

Решетников А.В., Бусов К.А., Мажейко Н.А., Коверда В.П. Закрученная струя перегретой жидкости в условиях интенсивных фазовых превращений …… 59

Рютин С.Б., Скрипов П.В. Теплоперенос в сверхкритических флюидах в масштабе малых характерных времен и размеров ……. 60

Рютин С.Б., Скрипов П.В. Опыт перегрева растворов: малые добавки – большие эффекты …….. 61

Скоков В.Н., Коверда В.П., Виноградов А.В., Решетников А.В. Стохастический резонанс в кризисных режимах кипения …… 62

Сычева Г.А. Величина потенциального барьера при образовании зародыша критического размера на границе раздела фаз стекло–кристалл в стеклах …….. 63

Татьяненко Д.В., Щёкин А.К. Нуклеация на частично смачиваемой поверхности: модельное описание и эффекты линейного натяжения и адсорбции …… 64

Тикина И.В., Барбин Н.М., Терентьев Д.И., Алексеев С.Г. Компьютерное моделирование термических процессов в сплаве Bi-Pb-Sn-Cd ……. 65

Типеев А.О., Байдаков В.Г., Проценко К.Р. Поверхностная свободная энергия межфазной границы кристалл-пар и поверхностное предплавление (молекулярно-динамическое моделирование) ……. 66

Томин А.С., Виноградов А.В., Файзуллин М.З., Коверда В.П. Кристаллизация водно-газовой смеси в сверхзвуковых молекулярных пучках воды и этана ……... 67

Тропин Т.В., Жаргалан Н., Авдеев М.В., Аксенов В.Л. Эволюция функций распределения кластеров по размерам в полярных растворах фуллерена C60 68

Файзуллин М.З., Виноградов А.В., Томин А.С., Коверда В.П. Фазовая устойчивость слоев аморфного льда в присутствии искусственно внесенных кристаллических центров ……... 69

Хищенко К.В. О границах достижимых состояний термодинамического равновесия в жидкости и газе при изоэнтропических процессах ……. 70

Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В. Вязкостные и акустические процессы в расплаве кобальта: теория и моделирование ……... 71

Чернов А.А., Пильник А.А. Спонтанная кристаллизация переохлажденных расплавов при больших отклонениях от равновесия …….. 72

Четвериков А.П., Сергеев К.С. Динамика метастабильных состояний в ансамбле взаимодействующих активных частиц, эволюционирующих под влиянием шума ……... 73

Чудновский В.М., Юсупов В.И., Невожай В.И., Жуков С.А., Пахалюк Ю.П. Лазероиндуцированное кипение биологических жидкостей в медицинских приложениях ……. 74

Шур В.Я., Ахматханов А.Р. Формирование самоподобных дендритных микро- и нанодоменных структур в сегнетоэлектриках ……. 75

Щёкин А.К., Аджемян Л.Ц., Бабинцев И.А. Тонкая структура медленной мицеллярной релаксации …….. 76

Юрицын Н.С. Плотность стекла в равновесных состояниях при температурах ниже температуры стеклования …… 77

Ягов В.В., Забиров А.Р., Кабаньков О.Н. Теплообмен при охлаждении высокотемпературных тел в недогретой жидкости …… 78

Владимир Павлович Скрипов (1927–2006)

– выдающийся ученый в области теплофизики и молекулярной физики, родился 16 июня 1927 года в Ленинграде. Научной работой начал заниматься в студенческие годы в Московском государственном университете под руководством профессора В.К. Семенченко.

В 1951-1953 годах, будучи аспирантом МГУ, провел серию экспериментов, в которых впервые для расслаивающихся растворов было установлено существование максимума теплоемкости в критической точке. Вместе с последующими исследованиями рассеяния света, эти работы внесли заметный вклад в формирование современных представлений о критических явлениях в жидкостях.

После защиты в 1953 году кандидатской диссертации, узнав об организованном в Уральском политехническом институте физико-техническом факультете, В.П. Скрипов добился распределения в Свердловск. С этим институтом и с академической наукой Урала в последующем была связана вся его научная деятельность. На кафедре молекулярной физики факультета проходило формирование научной школы В.П. Скрипова, основными направлениями которой стали метастабильные фазовые состояния, кинетика нуклеации при кипении и кристаллизации жидкостей, критические явления. В это время были сформулированы представления о термодинамической природе кризиса кипения, ударном режиме вскипания жидкостей, спинодали как огибающей ряда изолиний, продолженных в метастабильную область.

С 1972 года В.П. Скрипов заведующий Отделом физико-технических проблем энергетики Уральского филиала АН СССР. Здесь под его руководством получили дальнейшее развитие исследования явления метастабильности, неравновесных процессов с фазовыми превращениями. Начаты работы по вскипающим потокам жидкости, криогенике, сверхпроводимости. В эти годы им введены понятия хорошо определенной метастабильности, иерархии характерных времен существования неравновесных структур, предложен новый подход к термодинамическому подобию в системе жидкость-кристалл. В 1988 году Отдел был реорганизован в Институт теплофизики, директором которого В.П. Скрипов оставался до 1998 года.

В 1981 году за исследования в области теплофизики В.П. Скрипов удостоен премии АН СССР им. И.И. Ползунова, а в 1999 году ему вместе с учениками за цикл работ «Метастабильные состояния жидкости: фундаментальные исследования и приложения к энергетике» присуждена Государственная премия Российской Федерации в области науки и техники. В 1987 году он избран член-корреспондентом АН СССР, а в 1992 году академиком Российской академии наук.

Подписано в печать 25/09.2017.
Печать офсетная. Бумага офсетная.
Формат 64x84 1/16. Усл. печ. л. 10
Тираж 100 экз. Заказ № 6610

Отпечатано в типографии «Альфа Принт».
620049, г. Екатеринбург, пер. Автоматики, д. 2Ж
Тел.: +7 (343) 222-00-34