

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

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
12-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

«АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ТЕОРИЯ И
ЭКСПЕРИМЕНТ»

«*Foundations of Atomistic Modeling and Simulation*»

В сборнике представлены тезисы докладов 12-го Российского симпозиума «Атомистическое моделирование, теория и эксперимент» (Новый Афон, 16-27 августа 2015 г.) Симпозиум является продолжением серии симпозиумов по проблемам физики ультраткоротких процессов в сильнонеравновесных средах, проводившихся с 2003 года. Как и ранее, специфика Симпозиума предполагает рассмотрение широкого вопросов, в которых анализируется динамика процессов в конденсированном веществе на молекулярном уровне и/или связываются мезо- и макроскопические подходы с молекулярными процессами. Молекулярное моделирование стало прорывным направлением современной науки. Соответственно, стержнем программы Симпозиума являются:

- 1) классическая молекулярная динамика,
- 2) квантовое атомистическое моделирование,
- 3) методы Монте Карло в статистической термодинамике и физической кинетике,
- 4) многомасштабные подходы, основанные на атомистическом моделировании,
- 5) экспериментальные работы, которые используются для верификации атомистического моделирования.

Тематика Симпозиума включает:

- фазовые равновесия, метастабильные состояния и их распад, стёкла,
- проблемы материаловедения, прочность и пластичность твёрдых тел при высокоскоростной деформации, ударные и детонационные волны,
- неидеальная плазма и разогретое плотное вещество (warm dense matter),
- пылевая плазма,
- динамика химических реакций,
- полимеры, биомолекулы и супрамолекулярные системы,
- научные основы нанотехнологий и др.

Тематика Симпозиума охватывает различные области науки. Междисциплинарность симпозиума позволяет рассматривать с единых позиций задачи, относящиеся к физике, химии, биологии, инженерным наукам и computer science.

Под редакцией

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

Благодарим Т. С. Костюченко и Н. Ю. Лопаницыну за помощь при подготовке сборника тезисов к изданию.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

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

Веб-сайт Симпозиума <http://jiht.ru/afon15>

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Агеев О.А., Балакирев С.В., Еременко М.М., Солодовник М.С.</i> Моделирование влияния потока димеров мышьяка на кинетику эпитаксиального роста пленки GaAs/GaAs(001) методом Монте-Карло	5
<i>Алероев М.А., Ашхотова И.Б., Ашхотов О.Г., Магкоев Т.Т., Блмев А.П.</i> Морфология поверхности алюминия после ионной бомбардировки	5
<i>Anisimov M.A.</i> Puzzles of cold water	6
<i>Ассовский И.Г., Рашковский С.А.</i> Синтез нанокompозитов при горении металлов. формирование молекулярных структур	6
<i>Бедрань З.В., Тимофеев А.В., Николаев В.С.</i> Компьютерное моделирование криогенной плазмы	6
<i>Быстрый Р.Г.</i> Спектры флуктуаций термодинамических величин в кулоновских системах	7
<i>Воронцов А.Г., Гельчинский Б.Р., Коренченко А.Е.</i> Основы мультимасштабного моделирование процессов конденсации	7
<i>Галиуллина Г.М., Орехов Н.Д., Стегайлов В.В.</i> Моделирование образования простых упорядоченных структур из углеродного пара	8
<i>Гельчинский Б.Р., Юрьев А.А., Дюльдина Э.В.</i> Атомистическое моделирование: принципы, методы, результаты	8
<i>Груздков А.А., Волков Г.А.</i> Инкубационное время кавитации и влияние ультразвукового поля на диаграмму фазового равновесия	9
<i>Кирова Е.М., Норман Г.Э., Тимофеев А.В.</i> Расчет коэффициентов переноса пылевой плазмы	9
<i>Кисленко С.А.</i> МД моделирование гетерогенных систем для задач электрохимии и коллоидной химии	10
<i>Кондратюк Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.</i> Расчет кинетических свойств жидкого n-триаконтана	11
<i>Кортаев П.Ю., Покаташкин П.А., Янилкин А.В.</i> Структурные переходы в карбиде бора под давлением	11
<i>Костюченко Т.С., Куксин А.Ю.</i> Моделирование взаимной диффузии урана и молибдена	11
<i>Красюк И.К., Бажулин А.П., Беликов Р.С., Семенов А.Ю., Розмей О.Н., Стучебрюхов И.А., Томут М., Фортвов В.Е., Хищенко К.В.</i> Экспериментально-теоретическое исследование динамической прочности графита при нано- и пикосекундном лазерном воздействии	12
<i>Кривошеев С.И., Магазинов С.Г.</i> Экспериментальное исследование скорости развития трещины при импульсном нагружении	12
<i>Куриленков Ю.К., Карпухин В.Т., Гуськов С.Ю.</i> Об особенностях ядерного DD синтеза в компактном вакуумном разряде с дейтерированным Pd анодом	13
<i>Ланкин А.В.</i> Рекомбинация в плотной ионной плазме	13
<i>Ланкин А.В., Норман Г.Э., Орехов М.А.</i> Пространственные и временные свойства сольватации иона и её влияние на его диффузию в простой жидкости	14
<i>Ленёв Д.Ю.</i> Молекулярное моделирование процесса конденсации	14
<i>Лопаницына Н.Ю., Куксин А.Ю.</i> Атомистическое моделирование и теоретическое описание нуклеации в расплавах металлов при растяжении	15
<i>Мазо М.А., Стрельников И.А., Балабаев Н.К., Олейник Э.Ф., Берлин А.А.</i> Корреляция локального объема и пластических перестроек при деформации стеклообразных полиметилена и олигомера 2,5,8-триметилдекана	16
<i>Маневич Л.И.</i> Нестационарная резонансная динамика осцилляторных цепей: аналитическое исследование и компьютерное моделирование	16
<i>Николаев В.С., Бедрань З.В., Тимофеев А.В.</i> Изучение свойств пылевых частиц в плазме тлеющего разряда при криогенных температурах	17
<i>Норман Г.Э., Саитов И.М., Стегайлов В.В.</i> Плазменный фазовый переход	17
<i>Орехов Н.Д., Стегайлов В.В.</i> Плавление графита: атомистическая кинетика согласовывает теорию и эксперимент	18
<i>Орехов Н.Д., Стегайлов В.В.</i> Моделирование адгезионных свойств интерфейса полиэтилен - углеродная нанотрубка	19
<i>Орешкин В.И., Чайковский С.А., Лабезкая Н.А., Орешкин Е.В.</i> Исследования устойчивости волны нелинейной диффузии магнитного поля	19
<i>Орешкин Е.В., Баренгольц С.А., Чайковский С.А., Орешкин В.И.</i> Моделирование пучка убегающих электронов для разряда в воздухе атмосферного давления	19
<i>Павлов Ю.С., Ревина А.А., Доброхотов В.В., Сурма А.М., Лагов П.Б., Климашин В.П., Непомнящий О.Н., Павлов В.А., Даниличев В.А.</i> Исследование воздействия импульсных пучков ионизирующих излучений с энергией 10 МэВ, мощностью 3ГВт и длительностью 20 пс на конденсированные тела в спектрофотометрической установке	19
<i>Писарев В.В., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.</i> Ретроградная конденсация углеводородных смесей	20
<i>Покаташкин П.А., Кортаев П.Ю., Янилкин А.В.</i> Атомистическое моделирование a-бора и карбида бора	20
<i>Поляков Д.Н., Шумова В.В., Василяк Л.М.</i> Автоколебания разряда постоянного тока с пылевыми частицами	21
<i>Прибатурин Н.А., Лежнин С.И., Алексеев М.В., Возжаков И.С., Меледин В.Г., Главный В.Г., Куликов Д.В.</i> Образование ударных волн и вихревых структур при взрывном вскипании перегретой жидкости	21
<i>Рудяк В.Я., Краснотуцкий С.Л., Минаков А.В., Гузей Д.В., Пряжников М.И.</i> Теплофизические свойства наножидкостей	22
<i>Савинцев А.П., Гавашели Ю.О.</i> Экспериментальное изучение разрушения хлорида натрия короткими лазерными импульсами	22
<i>Семёнов В.П., Тимофеев А.В.</i> Расширенное уравнение Матве в пылевой плазме	22
<i>Сергеев О.В., Янилкин А.В.</i> Исследование кинетики термического разложения энергетических материалов методами реакционной молекулярной динамики	23

<u>Тен К.А., Титов В.М., Кулипанов Г.Н., Аульченко В.М., Толочко Б.П., Прууэл Э.Р., Кашикарое А.О., Шестман Л.И., Жуланов В.В., Косов А.Н., Евдоков О.В., Шарафутдинов М.Р.</u> Новые возможности станции по исследованию мощных энергетических материалов базе коллайдера ВБПП-4М.	23
<u>Тимофеев А.В.</u> Пылевая плазма как уникальный объект исследования	24
<u>Харламов Г.В., Жилкин С.В.</u> Компьютерное моделирование молекулярной диффузии в условиях фазового перехода пар - жидкость	24
<u>Хищенко К.В.</u> Об изоэнтропических течениях в ударно-волновых экспериментах	25
<u>Шумова В.В., Поляков Д.Н., Василяк Л.М.</u> Трансформация плазменно-пылевой ловушки в тлеющем разряде	25
ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ	26
ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ	27

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОТОКА ДИМЕРОВ МЫШЬЯКА НА КИНЕТИКУ ЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА ПЛЕНКИ GaAs/GaAs(001) МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Агеев О.А., Балакирев С.В.* , Еременко М.М., Солодовник М.С.

ИНЭП ЮФУ, Таганрог,

*s.v.balak@gmail.com

В теоретических работах, посвященных молекулярно-лучевой эпитаксии структур на основе материалов $A^{III}B^V$, наиболее часто рассматриваются зависимости микроскопических параметров, таких как коэффициент диффузии, время жизни адатомов и др., от температуры и скорости роста. При этом наименьшее внимание уделяется исследованию влияния потока молекул V группы. В то же время из экспериментальных данных известно, что поток V группы оказывает существенное влияние на кинетику роста как тонких пленок, так и наноструктур [1, 2].

В настоящей работе с помощью метода Монте-Карло проведено имитационное моделирование эпитаксиального роста пленки GaAs на поверхности GaAs(001) с учетом влияния потока мышьяка, осаждаемого в виде димеров, на кинетику ростовых процессов.

Согласно результатам моделирования, островки зарождаются преимущественно в траншеях реконструированной поверхности GaAs(001) на парах атомов Ga, в соответствии с [3], и имеют продолговатую форму в связи с анизотропностью поверхностной диффузии. После осаждения 0.06 монослоя (МС) GaAs при $T = 580^\circ\text{C}$, $v = 0.1$ МС/с плотность островков выходит на насыщение и составляет $2 \cdot 10^{12}$ см $^{-2}$, что согласуется с экспериментальными данными [4].

Было выявлено, что на плотность островков оказывает влияние поток димеров мышьяка, что наиболее заметно проявляется при больших скоростях роста. При скорости роста $v = 1$ МС/с плотность островков изменяется более чем в 2 раза при увеличении потока As_2 от $9.4 \cdot 10^{13}$ до $1.3 \cdot 10^{15}$ см $^{-2}$ с $^{-1}$. Такая зависимость объясняется увеличением количества центров нуклеации, образующихся при объединении пар атомов галлия с димерами мышьяка [3].

Согласно расчету доли атомов мышьяка в пленке GaAs при различных технологических параметрах, наибольшая десорбция мышьяка наблюдается при больших температурах ($T = 580\text{--}610^\circ\text{C}$) и низких скоростях роста ($v = 0.01\text{--}0.1$ МС/с). Более того, при $v = 0.01$ МС/с для обеспечения стехиометрического роста GaAs необходимы повышенные потоки мышьяка, так как доля атомов мышьяка превышает 0.5 при $J_{As_2} > 3 \cdot 10^{15}$ см $^{-2}$ с $^{-1}$. В противном случае избыточные адатомы Ga формируют цепочки, не связанные с атомами мышьяка.

Таким образом, поток димеров мышьяка оказывает существенное влияние на рост GaAs/GaAs(001) и является важным управляющим параметром метода МЛЭ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №15-19-10006). Результаты получены с использованием оборудования Центра коллективного пользования и Научно-образовательного центра «Нанотехнологии» Южного Федерального Университета.

1. LaBella V.P., Bullock D.W., Ding Z., Emery C., Harter W.G., Thibado P.M. // J. Vac. Sci. Tech. A. 2000. V.18. №4. P.1526.
2. Riel B.J., Hinzer K., Moisa S., Fraser J., Finnie P., Piercy P., Fafard S., Wasilewski Z.R. // J. Cryst. Growth. 2002. V.236. P.145.
3. Балакирев С.В., Блинов Ю.Ф., Солодовник М.С. // Известия ЮФУ. Технические науки. 2014. №9(158). С.94.
4. Avery A.R., Dobbs H.T., Holmes D.M., Joyce B.A., Vvedensky D.D. // Phys. Rev. Lett. 1997. V.79. P.3938.

МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ АЛЮМИНИЯ ПОСЛЕ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКИ

Алероев М.А.*¹, Ашхотова И.Б.¹, Ашхотов О.Г.¹, Магжоев Т.Т.², Блиев А.П.²

¹КБГУ, Нальчик, ²СОГУ, Владикавказ,

*muslim-1892@mail.ru

Известно [1], что контакт атомарно-чистых поверхностей металлов с ионами инертных газов в зависимости от режима облучения может приводить в одних случаях к эрозии поверхности, а в других – к ее сглаживанию (ионной полировке). На наш взгляд, было бы интересно выяснить, как влияют на морфологию поверхности поликристаллических металлов ионы инертных газов, когда на поверхности присутствует оксидный слой. По этой причине, целью настоящей работы было изучение рельефа поверхности поликристаллического алюминия с естественным оксидным слоем при облучении ионами аргона. Образец для исследования представлял собой пластину полированного (паста ГОИ и алмазная паста АСМ12/ПВМХ) поликристаллического Al чистотой 99,995 ат.В результате проведенных исследований было установлено, что на поверхности алюминия с естественным оксидным покрытием, не обработанной ионным пучком, средняя арифметическая шероховатость была 20 нм, а после длительной ионной обработки – 270 нм. Облучение поверхности однократно ионизированными атомами аргона с энергией 500 эВ не приводило к стравливанию оксидного слоя [3], а на оже-спектрах помимо пиков алюминия и кислорода появлялись пики аргона и азота, причем низкоэнергетический пик Al занимал положения 61,1 эВ, обусловленный, возможно, междуатомным электронным переходом $AlNaI - L_{2,3}L_{2,3}V$. Поэтому полученный результат мы объясняем накоплением бомбардирующих ионов в междоузельных пустотах поверхности, в результате чего образуется пересыщенный твердый раствор из атомов мишени и бомбардирующих ионов аргона и азота, захватываемого ионным пучком из остаточного газа рабочей камеры спектрометра. По-видимому, длительная бомбардировка ионами аргона в наших экспериментальных условиях приводит к комбинированию Al, Al_2O_3 , и AlN, из которых формируется слой оксинитрида $(AlN)_x(Al_2O_3)_{1-x}$.

Список литературы

1. Беграмбеков Л.Б. // Итоги науки и техники. Серия «Пучки заряженных частиц». 1993. Т.7. С.4-57. 2. Овчинников В.В. // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 9. С. 991-1001. 3. Ashkhotov O.G., Zdravomislov M.V. // Surf.sci.1995. 339, P.279-285.

PUZZLES OF COLD WATER

Anisimov M.A.

University of Maryland, USA

**anisimov@umd.edu*

Liquid water is still a puzzle. This is probably the most studied and yet least understood state of matter. Something dramatic happens with liquid water below the "biological" temperature (30-40 °C). Unlike ordinary substances, one can regard water near the triple point and in the supercooled region, on the one side, and water near the vapor-liquid critical point, on the other side, as "the same substance – two different liquids". Highly-compressible, low-dielectric-constant near-critical water is commonly used as a supercritical-fluid solvent. On the low-temperature side of the phase diagram, water is an almost incompressible, high-dielectric constant solvent with mysterious thermodynamic anomalies. These anomalies become especially pronounced in the supercooled water that exists between the melting line and the line of homogeneous ice formation. A popular hypothesis that explains the anomalies of cold and supercooled water is the existence of a metastable liquid-liquid transition hidden just below the line of homogeneous ice nucleation. We have developed an equation of state for the thermodynamic properties of cold and supercooled water, in which water is considered as a non-ideal "mixture" of two alternative structures. The equation is valid for temperatures from the homogeneous ice nucleation temperature up to 300 K and for pressures up to 400 MPa, and can be extrapolated up to 1000 MPa. This equation has been adopted by the International Association for the Properties of Water and Steam (IAPWS) as an official Guideline for scientific and industrial use.

СИНТЕЗ НАНОКОМПОЗИТОВ ПРИ ГОРЕНИИ МЕТАЛЛОВ. ФОРМИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

Ассовский И.Г., Рашковский С.А.*

ИХФ РАН, Москва,

**assov@chph.ras.ru*

Физика многокомпонентных ультрадисперсных частиц представляет интерес для многих областей естественных наук, в связи с перспективами разработки новых уникальных материалов. К их числу относятся, например, наноконпозиты, содержащие наноразмерные частицы органических и неорганических веществ, металла и керамики, металла и углерода. Следует отметить существенный прогресс в нанохимии и нанофазном материаловедении таких композитов, достигнутый в последние годы. Особый интерес вызывают технологии высокотемпературного синтеза наноконпозитов, такие как лазерный синтез и технологическое горение. В числе успешных примеров отметим синтез неорганических материалов с помощью СВС-метода [1], лазерный синтез металлоуглеродных наноконпозитов [2], а также синтез ультрапористых наноструктурных керамик (аэрогелей) при горении энергоемких металлов (алюминия, циркония, цинка, и др.) в различных газовых средах [3,4]. Целью представленного исследования был экспериментальный и теоретический анализ механизма формирования структуры нанокерамики при горении металлических частиц в различных газовых средах. Для этого были разработаны и созданы оригинальные экспериментальные установки, позволившие установить закономерности высокотемпературного окисления металла в газовой фазе и на поверхности горящей частицы, а также разработан модифицированный метод молекулярно-динамического моделирования [5], позволяющий эффективно учитывать (в потенциале взаимодействия частиц) силы различной природы. Предметом изучения в данной работе являлась не динамика процесса образования наноконпозитов, а их конечные равновесные формы. Установлено, что термофоретические силы являются наиболее важными регулярными силами, действующими на наночастицы и кластеры, образующиеся в процессах горения. Именно термофорез приводит к сближению наночастиц, росту наноконпозиций и их агрегатов. Детально рассмотрено формирование сферических наноконпозиций и цилиндрических нанотрубок.

1. // Самораспространяющийся высокотемпературный синтез: теория и практика. Сб. статей. Черноголовка: ИС-МАН, "Территория 2001, 432 с.
2. И.Г. Ассовский, Г.И. Козлов. "Синтез одностенных углеродных нанотрубок лазерной абляцией графита при нормальных условиях // Доклады академии наук, Физическая химия, 2003, т. 388, № 3, сс. 349-353.
3. И.Г. Ассовский, А.Н. Стрелецкий, В.И. Колесников-Свинарев, «Механизм образования конденсированной фазы при горении алюминия в двуокиси углерода», // ДАН, Физическая химия, 2005, т. 405, № 3, сс. 355-359.
4. Ассовский И.Г., Колесников-Свинарев В.И., Кузнецов Г.П., Горенберг А.Я. «Аэрогели: газофазный синтез и структура», // В сб. «80 лет ИХФ РАН. Химическая физика вчера, сегодня, завтра», М.: ИХФ РАН, Торус Пресс, 2011, с.52.
5. И.Г. Ассовский, С.А. Рашковский, "Молекулярно-динамическое моделирование синтеза наноконпозитов // ДАН, Физическая химия, 2002, т. 385, № 3, сс. 359 – 362.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИОГЕННОЙ ПЛАЗМЫ.

Бедрань З.В., Тимофеев А.В., Николаев В.С.*

ОИВТ РАН, Москва,

**zbedran@yandex.ru*

Пыль и пылевая плазма широко распространены в космосе. Они присутствуют в планетных кольцах, хвостах комет, в межпланетных и межзвездных облаках [1-6]. Пылевая плазма обнаружена вблизи искусственных спутников земли и космических аппаратов [5, 6], в термоядерных установках с магнитным удержанием [7-9]. Наконец, очень активно исследуется пылевая плазма в лабораторных условиях. Пылевые частицы, находящиеся в плазме, приобретают электрический заряд и представляют собой дополнительную заряженную компоненту плазмы, оказывающую значительное влияние на состояние плазмы в целом.

В неравновесной плазме газовых разрядов низкого давления, несмотря на высокую энергию электронов, ионы, атомы и макроскопические частицы, как правило, остаются «холодными», что позволяет уменьшить их температуру до криогенной и наблюдать специфические эффекты. В частности, экспериментально было обнаружено

изменение ионного состава плазмы при температурах порядка десятков кельвинов и образование различных пылевых структур.

В работе исследуется пылевая плазма при различных температурах (4,7 – 300 К).

Основной целью работы является построение теоретической модели, описывающей плазменно-пылевые структуры при низких температурах, которая хорошо бы согласовывалась с результатами эксперимента.

Первым этапом исследования является обработка экспериментальных данных, полученных группой Рауля Хабибуловича Амирова в ОИВТ РАН. Мы обработали результаты 3 лет экспериментов, построили графики зависимостей основных параметров плазмы (ток разряда, давление в трубке, напряжение на электродах) друг от друга. Особое же внимание уделили зависимости среднего межчастичного расстояния от температуры. Полученные графики показывают сложную зависимость среднего межчастичного расстояния от температуры. Межчастичное расстояние близко к радиусу Дебая только для относительно высоких температур (300К). При понижении температур включается много сторонних эффектов (изменение ионного состава, усиление вклада в экранирование пылевой компоненты).

Этот факт послужил поводом к проведению численного эксперимента. Моделирование проводили путём непосредственного численного решения уравнений Ньютона. Оценка сил, действующих на пылевую компоненту, показала, что основной вклад в динамическое поведение структуры дают силы взаимного электрического отталкивания и удерживающее поле страты. Однако и вклад термофоретической силы, силы тяжести и силы трения о нейтралы учитывался. Основная проблема, возникшая в ходе работ – весьма затруднённая оценка заряда пылевой компоненты, концентраций ионов и электронов. Оценка заряда пылевых частиц проводилась в рамках OML приближения, причем заряд флуктуировал во времени.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01295).

1. Goertz C K Rev. Geophys. 27 271 (1989)
2. Northrop T G. Phys. Scripta. 45 475 (1992)
3. Цытович В Н УФН 167 57(1997)
4. Bliokh P, Sinitsin V, Yaroshenko V Dusty and Self-Gravitational Plasmas in Space (Dordrecht: Kluwer Academic, 1995)
5. Whipple E C Rep. Prog. Phys. 44 1197 (1981)
6. Robinson P A, Coakley P IEEE Transactions Electr. Insulation 27 944 (1992)
7. Цытович В Н, Винтер Д УФН 168 899 (1998)
8. Winter J, Gebaner G J. Nucl. Mater. 269 228 (1999)
9. Winter J Phys. Plasmas 7 3862 (2000)

СПЕКТРЫ ФЛУКТУАЦИЙ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН В КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМАХ

Быстрый Р.Г.

ОИВТ РАН, Москва,

broman.meld@gmail.com

Методом классической молекулярной динамики (МД) исследованы флуктуации давления в неидеальной электрон-ионной плазме. Для расчетов была использована формула, основанная на теореме вириала. Изучены спектры колебания давления однократно ионизованной неидеальной плазмы. Наблюдается типичный $1/f$ спектр. Другими словами фликкер-шума наблюдается в колебаний равновесного давления неидеальной плазмы. Полученный результат, на первый взгляд, противоречит общепринятому мнению о гауссовости колебаний давления [1]. В работе обсуждаются пути разрешения этого парадокса. Результаты представленные в докладе могут служить численной иллюстрацией противоречий между подходами Гиббса и Эйнштейна к описанию флуктуаций термодинамических величин [2].

Работа является непосредственным продолжением работы [3], в которой и было впервые обнаружено отличие колебаний давления неидеальной плазмы от нормального распределения. В работах [4-7] представлены МД исследования спектров колебаний потенциальной энергии различных биологических моделей с кулоновским взаимодействием. Каждая из них объясняет обнаруженные аномалии биологическими особенностями своей системы. Вышеперечисленное делает особенно интересным обсуждение спектров термодинамических величин как инструмента исследования очень разных МД систем.

Работа поддержана грантом РФФ 14-19-01295.

1. Landau L. D., Lifshitz E. M. Statistical Physics, Vol. 1 Oxford: Pergamon. 1980.
2. Rudoi Y. G., Sukhanov A. D. // Phys-Usp+ 2000. V. 43. P. 1169.
3. Lankin A., Norman G., Saitov I. // Contrib. Plasm. Phys. 2010. V. 50. P. 99-103.
4. Sasai M., Ohmine I., Ramaswamy R. // J. Chem. Phys. 1992. V. 96. P. 3045.
5. Bizzarri A. R., Cannistraro S. // Physica A. 1999. V. 267. P. 257-270.
6. Dewey T. G., Bann J. G. // Biophys. J. 1992. V. 63. P. 594-598.
7. Bizzarri A. R., Cannistraro S. // Phys. Lett. A. 1997. V. 236. P. 596-601.

ОСНОВЫ МУЛЬТИМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ КОНДЕНСАЦИИ

*Воронцов А.Г.*¹, Гельчинский Б.Р.², Коренченко А.Е.¹*

¹ЮУрГУ, Челябинск, ²ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург,

**sas@physics.susu.ac.ru*

В работе рассмотрены подходы, применяющиеся при мультимасштабном моделировании в физике конденсированного состояния. Выделяются четыре уровня масштабов: электронный, атомный, мезоскопический и макроскопический. На электронном уровне используются методы квантовой химии для вычисления электронных состояний и электронной плотности. Процессы на атомном уровне изучаются через моделирование методами молекулярной

динамики и Монте-Карло. Моделирование на макроскопическом уровне успешно осуществляется через дифференциальные уравнения механики сплошной среды. И только для мезоскопического уровня (нанометры, наносекунды) не предложено надежных методик осуществления моделирования. Это обусловлено отсутствием надежных способов учета стохастичности происходящих процессов, а также развитием коллективных явлений из-за сильного взаимовлияния изменений, происходящих внутри рассматриваемой подсистемы с изменениями в соседних подсистемах. Указанные трудности определяют то, что вместо непосредственного моделирования при помощи ЭВМ обычно осуществляется численное определение параметров, входящих в какую-либо теоретическую модель, описывающую систему на данном масштабе. Примерами таких моделей являются метод фазового поля, теория распада метастабильных состояний, теория нуклеации и т.д. Отметим, что все теоретические модели содержат допущения, которые зачастую нарушаются.

В данной работе рассматривается один из способов построения схемы мультимасштабного моделирования процесса конденсации металлического пара в среде инертного газа. Рассматриваются процессы, происходящие в установившемся состоянии получения ультрадисперсных порошков. На макроскопическом уровне моделирования решается задача газодинамики для смеси пара металла, металлических комплексов разных размеров и инертного газа. Решение дифференциальных уравнений в частных производных проводится сеточным методом. Для учета изменения состава смеси при конденсации, в каждом узле сетки задается состав смеси (распределение кластеров по размерам), которое изменяется с течением времени из-за процессов конденсации, а также из-за диффузии и конвективного массопереноса между узлами. Изменение состава смеси в каждой ячейке, происходящее из-за конденсации, может быть найдено из уточнения теории нуклеации на основе данных атомистического моделирования при. Приведены основные положения классической теории нуклеации, нуждающиеся в уточнении для количественного описания протекающих процессов, и предложена схема получения набора параметров, необходимых для численной реализации указанных уточнений.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОСТЫХ УПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР ИЗ УГЛЕРОДНОГО ПАРА

Галиуллина Г.М. , Орехов Н.Д. Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

**gulnaz_g@inbox.ru*

Благодаря своим необычным свойствам упорядоченные углеродные структуры уже не первое десятилетие привлекают внимание исследователей. Однако их применимость в настоящее время ограничена из-за высокой себестоимости. Более глубокое понимание механизмов роста структур будет способствовать преодолению этого препятствия. Сравнительно дешевым способом получения упорядоченных структур является кластеризация этих продуктов в плотном разогретом паре углерода. Компьютерное моделирование методами молекулярной динамики дает возможность исследовать детали процесса образования упорядоченных структур.

Работа проведена методами молекулярной динамики с использованием недавно разработанного реакционного потенциала ReaxFF (Reactive Force Field) [1,2], который учитывает разрыв и образование связей более аккуратно по сравнению с другими эмпирическими потенциалами за счет включения в модель как короткодействующих, так и дальнедействующих сил. Использование такого усложненного силового поля позволит получить более точную информацию о синтезе упорядоченных структур, что в дальнейшем поможет подобрать соответствующие корректные характеристики разогретого пара углерода на практике. С помощью данного потенциала можно проводить расчеты с квантово-механической точностью, но при этом не затрачивая таких компьютерных ресурсов, как при эмпирических вычислениях.

Проанализировано влияние межатомного потенциала на образование упорядоченных структур в газовой фазе. На примере процесса нуклеации углерода проведено сравнение потенциалов ReaxFF и AIREBO [3]. Расчеты проводились в программном пакете LAMMPS [4].

Проанализированы потенциальные барьеры на присоединение и отрыв атомов.

В данной работе проводится исследование нуклеации упорядоченных углеродных структур из газовой фазы при различных температурных режимах. Показано, что при понижении температуры с 3000К до 1500К и сжатии ячейки произошла кластеризация карбинов из гомогенного углеродного пара. Эти соединения представляют собой линейные полимеры, состоящие из sp-гибридизованных атомов углерода. Недавние эксперименты по синтезу и изучению свойств карбинов выявили, что цепочки из sp-гибридизованного углерода оказались более прочными по сравнению с другими аллотропными формами углерода.

Работа поддержана грантом РФФИ 14-50-00124.

1. van Duin A.C.T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W.A. // Journ. of Physical Chemistry A. 2001. V.105. ¶.9396-9409.
2. Chenoweth K., van Duin A. C. T., Goddard W. A // The Journal of Physical Chemistry A. 2008. V.112. ¶. 1040-1053.
3. Stuart Steven J., Tutein Alan B., Harrison Judith A. // The Journal of chemical physics. 2000. V.112.14. ¶. 6472-6486.
4. Программный пакет LAMMPS. URL: <http://lammps.sandia.gov>

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ: ПРИНЦИПЫ, МЕТОДЫ, РЕЗУЛЬТАТЫ

*Гельчинский Б.Р.*¹, Юрьев А.А.¹, Дюльдина Э.В.²*

¹ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, ²МагГТУ, Магнитогорск,

**brg47@list.ru*

Классическая молекулярная динамика позволяет изучать системы с очень большим числом частиц и получать информацию о структуре неупорядоченных систем и ее взаимосвязи со свойствами. Однако при этом необходимо задать потенциал межатомного взаимодействия, который должен быть вычислен отдельно. Таким образом, остается не решенной важнейшая задача для металлических систем - самосогласование электронной и ионной подсистем, что не позволяло получать достоверную информацию о взаимосвязи атомной и электронной структуры металлов. Как следствие было невозможно проводить точный расчет свойств жидких металлов (в том числе и электронных). Эффективный первопринципный (ab initio) метод решения проблемы самосогласования электронной и атомной структуры был развит в ставшей классической работе Кара и Паринелло [1]на основе идеи о том,

что нет необходимости проводить порознь расчеты электронной и атомной подсистем, а их самосогласованность достигается одновременной минимизацией функционала свободной энергии по электронным и ионным степеням свободы. Сходимость при этом достигается одновременным решением зависящего от времени уравнения движения для волновой функции и интегрированием уравнений движения ионов. Это ведет к связанному ряду уравнений теории функционала плотности и молекулярной динамики, которые позволяют выполнять МД - моделирование из первых принципов, где используются лишь предположения о справедливости классической механики для описания ионного движения и приближение Борна-Оппенгеймера для разделения ядерных и электронных координат. Метод получил название первопринципная («ab initio» или квантовая) молекулярная динамика и он практически применим к любым системам. Применение метода первопринципной молекулярной динамики позволяет корректно и самосогласованно описывать и прогнозировать электронную структуру и свойства неупорядоченных металлических систем в широкой области термодинамических параметров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 15-03-04182)

Литература

1. Car R., Parrinello M. Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory. // Phys.Rev.Lett., 1985. V. 55. N22 P.2471-2475. 2. Soler J.M., Artacho E., Gale J. et. al. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. // J.Phys.: Cond.Matter., 2002. V. 14. P. 2745-2779.

ИНКУБАЦИОННОЕ ВРЕМЯ КАВИТАЦИИ И ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ПОЛЯ НА ДИАГРАММУ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ

Груздков А.А.*¹, Волков Г.А.²

¹СПбГТИ(ТУ), ²ИПМАШ РАН, Санкт-Петербург

*gruzdkov@mail.ru

Явление кавитации в жидкостях, которое в течение долгого времени рассматривалось как сугубо негативное, в последние годы получает все более широкое применение в различных технологических процессах (очистка поверхностей, интенсификация химических реакций и пр.) и медицине (липосакция жировых тканей).

Порог кавитации, под которым понимается величина, на которую надо понизить давление для наступления кавитации, обнаруживает сильную зависимость от временных характеристик процесса (длительность импульса, частота ультразвукового поля) и температуры. Анализ экспериментальных данных показывает, что наблюдаемые эффекты могут быть объяснены в рамках концепции инкубационного времени. Был предложен критерий кавитации вида

$$\frac{1}{\tau(T)} \int_{t-\tau(T)}^t \text{sign}(P(t')) \left| \frac{P(t')}{P_c(T)} \right|^\alpha dt' \leq 1,$$

где $P(t)$ — зависящее от времени давление, P_c — порог кавитации, τ — инкубационное время, α — безразмерный параметр нелинейности, T — температура. Влияние температуры на инкубационное время задается законом Аррениуса

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{G}{kT}\right),$$

где G — энергия активации, k — постоянная Больцмана. Зависимость порога кавитации от температуры определяется кривой фазового равновесия жидкость-пар.

В рамках рассматриваемого подхода жидкость, находящуюся под воздействием ультразвукового поля, можно трактовать как среду с другими физическими свойствами и, в частности, с другой кривой фазового равновесия. Произведенные расчёты показывают хорошее соответствие с экспериментальными данными.

Используемые в модели параметры обычно относят к мезоуровню, поскольку они являются интегральными характеристиками процессов, протекающих на микроуровне. Инкубационное время является характерным временем релаксации, связанной с ростом парогазовых полостей, порог кавитации определяется, в частности, поверхностным натяжением для полостей малого радиуса. Для независимой оценки значений параметров, используемых в модели, наиболее эффективным методом является сопоставление с результатами атомистического моделирования.

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЕРЕНОСА ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ

Кирова Е.М.*, Норман Г.Э., Тимофеев А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

*kirova@phystech.edu

В работе исследуется поведение коэффициентов переноса для модели пылевой плазмы. Были рассмотрены коэффициенты сдвиговой и объемной вязкости, а также коэффициент теплопроводности.

Основываясь на уравнениях движения Нормана-Тимофеева [1,2], методом молекулярной динамики были получены траектории пылевых частиц. Отличительной особенностью системы уравнений является учет таких эффектов как зависимость электрического поля от вертикальной составляющей, флуктуации заряда пылевых частиц в приэлектродном слое, зависимость заряда частицы от локального окружения, зависимость заряда пылевых частиц от расстояния между частицами, а также трение о нейтральный газ. Ниже приведено уравнение движения для пылевой частицы:

$$m\ddot{r}_i = F_i^{inter}(r, t) + F_i^{trap}(r, t) + F_i^{fr}(\dot{r}, t) + F_i^{grav} + F_i^{el}(r, t), \quad (1)$$

где F_i^{inter} — сила взаимодействия между частицами, F_i^{trap} — сила ловушки, F_i^{fr} — сила трения между пылевой частицей и окружающей средой, F_i^{grav} — сила тяжести, F_i^{el} — влияние электрического поля приэлектродного слоя.

Коэффициент сдвиговой вязкости находился по формуле Эйнштейна-Гельфанда [3]:

$$\eta = \lim_{N, V, t \rightarrow \infty} \frac{1}{2k_B T V t} \langle \left[\sum_{i=1}^N x_i(t) p_i^y(t) - \sum_{i=1}^N x_i(0) p_i^y(0) \right]^2 \rangle, \quad (2)$$

где η - коэффициент сдвиговой вязкости, V - объем системы частиц, i - номер частицы, T - температура системы, k_B - константа Больцмана, $\langle \dots \rangle$ - усреднение по ансамблю. Аналогичная методика использовалась для вычисления коэффициента теплопроводности.

Коэффициент сдвиговой вязкости также был рассчитан по формуле Грина-Кубо с использованием автокорреляционной функции [4].

Вычисления проводились для трехмерной гомогенной системы с периодическими граничными условиями. Была получена зависимость вязкости от количества частиц. В работе была рассмотрена зависимость коэффициента сдвиговой вязкости от амплитуды флуктуации заряда пылевой частицы при различных коэффициентах трения. Полученные значения коэффициента находятся в согласии с экспериментальными данными [5].

Также был рассмотрен приэлектродный слой газового разряда в потенциале-ловушке. Рассмотрено не только влияние амплитуды флуктуации на коэффициент вязкости, но и переменности заряда по вертикальной координате и по горизонтали при различных коэффициентах силы трения и при различных соотношениях горизонтальной и вертикальной температур. Проведено исследование анизотропной вязкости.

Работа частично поддержана грантом Российского Научного Фонда №14-19-01295.

1. Norman G.E., Timofeev A.V. // Phys. Rev. E. 2011. V.84. P.056401.
2. Norman G.E., Stegailov V.V., Timofeev A.V. // JETP. 2011. V.113 P.887.
3. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulations. Cambridge: CUP, 2005.
4. Viscardy S., Servantie J., Gaspard P. // J. Chem. Phys. 2007. V.126. P.184512.
5. Vorona N.A., Gavrikov A.V., Ivanov A.S., Petrov O.F., Fortov V.E., Shakhova I.A. // JETP. 2007. V.105 P.824.

МД МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМ ДЛЯ ЗАДАЧ ЭЛЕКТРОХИМИИ И КОЛЛОИДНОЙ ХИМИИ

Кисленко С.А.

ОИВТ РАН, Москва,

kislenko@ihed.ras.ru

В докладе представлен обзор оригинальных работ по МД моделированию гетерогенных систем для задач электрохимии и коллоидной химии. В электрохимических исследованиях основной упор сделан на моделирование структуры различных типов электролитов (ионные жидкости, молекулярные растворители) вблизи различных поверхностей и анализе влияния межфазной структуры на кинетику гетерогенных процессов. В частности показано, что слоистая структура электролита на поверхности Au(111) существенно влияет на распределение редокс-активных компонентов вблизи электрода, и, следовательно, на кинетику гетерогенного переноса электрона. Из DFT расчетов найдено, что при расстоянии до поверхности меньше 0.6 нм, реализуется адиабатический механизм переноса электрона с независимым от расстояния электронным трансмиссионным коэффициентом.

Отдельное внимание уделено исследованию межфазной границы TiO_2 /ацетонитрил, актуальность которого определяется поиском возможностей повышения КПД ячеек Гретцеля. Показано, что адсорбирующиеся на поверхности TiO_2 молекулы ацетонитрила создают упорядоченный монослой, который эффективно пассивирует поверхность, уменьшая рекомбинацию электронов на редокс-активных частицах I_2^- и I_3^- . Найдено, что тип катиона существенно влияет на распределение анионов I^- вблизи поверхности, участвующих в процессе восстановления хемосорбированных на поверхности TiO_2 молекул красителя. Предложено, что наблюдаемое изменение локальной концентрации I^- вблизи поверхности в зависимости от катиона может являться причиной экспериментально наблюдаемых различий скорости восстановления красителей в электролитах разного катионного состава.

Изучена ионная и молекулярная проницаемость монослоев алкантиолов на поверхности золота. Обнаружено, что проникновение компонентов электролита в монослой под действием поверхностного заряда носит пороговый характер. Показано, что механизм проницаемости ионов в ионных жидкостях качественно отличается от механизма в водных растворах, который представляет собой двухстадийный процесс, включающий формирование полярного канала из молекул воды в монослой и последующий транспорт ионов по полярному каналу к поверхности металла. Установлено, что бездефектные монослои непроницаемы для компонентов электролита при потенциалах, соответствующих области электрохимической стабильности монолоя.

В части доклада, посвященной коллоидным системам, методом МД изучается взаимодействие квантовых точек (полупроводниковых нанокристаллов) в коллоидном растворе с целью разработки метода самосборки наночастиц в ансамбли заданной структуры. Актуальность работы определяется перспективами использования упорядоченных структур квантовых точек в солнечных элементах, светодиодах, биосенсорах и др. Найдено, что увеличение лиофильности частиц по отношению к растворителю способствует их агрегации, и наоборот, увеличение лиофильности приводит к диспергированию частиц в коллоидном растворе. Показано, что влияние лигандной оболочки наночастиц не сводится только к изменению взаимодействия поверхности квантовой точки с растворителем. Переход от мягкой органической оболочки к жесткой кристаллической поверхности позволяет наблюдать осциллирующий потенциал средней силы в сильно сольватирующей среде за счет образования слоистой структуры растворителя в зазоре между гранями сближаемых нанокристаллов.

В заключительной части приводятся результаты исследования термодинамики процесса мицеллообразования в двухкомпонентной системе поверхностно-активное вещество АОТ - циклогексан. Методом термодинамического интегрирования установлена зависимость химического потенциала молекул АОТ от числа агрегации. Рассчитанное распределение мицелл по размерам предсказывает высокую монодисперсность мицелл; средний размер мицелл хорошо согласуется с экспериментом.

РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЖИДКОГО Н-ТРИАКОНТАНА

Кондратюк Н.Д.*¹, Норман Г.Э.², Стегайлов В.В.²

¹МФТИ, Долгопрудный, ²ОИВТ РАН, Москва,

*kondratyuk@phystech.edu

Задачи исследования и оптимизации свойств углеводородных жидкостей представляют как научную, так и прикладную ценность. Это объясняется тем, что углеводороды входят в состав смазочных, изоляционных и топливных смесей. В работе используются методы молекулярной динамики для расчета коэффициентов диффузии и вязкости жидкого н-триаконтана C₃₀H₆₂ [1].

Расчеты проводились с использованием полноатомных потенциалов DREIDING [2] и OPLS [3] (для всех атомов в системе) и потенциала объединенного атома TraPPE [4] (для псевдоатомов CH₂ и CH₃ групп). Энергия взаимодействия во всех моделях представляется в следующем виде: $E = E_{bond} + E_{angle} + E_{torsion} + E_{LJ} + E_{Coul}$. Первое слагаемое – взаимодействие (связь) ближайших соседей в молекуле, второе и третье – угловое и торсионное. Четвертое и пятое слагаемые описывают Леннард-Джонсовское и кулоновское взаимодействия соответственно, которые присутствуют как внутри одной молекулы, так и между молекулами жидкости. Проведено сравнение потенциалов по их вычислительной сложности, воспроизводимым физическим и кинетическим свойствам.

Вывод на равновесие проводится в несколько этапов. Во всех трех моделях газ разупорядоченных молекул конденсируется путем сжатия элементарной ячейки на протяжении 0.1 нс к экспериментальной плотности. Шаг интегрирования 1 фс. Далее проводится нагрев системы в течение 0.5 нс во избежание образования метастабильных состояний. В NPT ансамбле жидкость релаксирует 2 нс. Среднее значение плотности на последних 0.5 нс берется для дальнейшего расчета. Затем система находится в NVT ансамбле 2 нс при 353 К и полученной плотности.

Помимо классических критериев релаксации используется относительный параметр асимметрии $\kappa^2 = 3(\lambda_x^4 + \lambda_y^4 + \lambda_z^4)/2(\lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2)^2 - 1/2$, где $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ – собственные числа тензора инерции молекулы. Если $\kappa^2 = 0$ – молекула плоская, если $\kappa^2 = 1$ – сферически симметричная относительно центра масс. По выходу (κ^2), усредненного по молекулам жидкости, на плато можно судить о наличии равновесия в системе.

Коэффициент диффузии D центров масс молекул рассчитывается с использованием формул Эйнштейна-Смолуховского $\langle \Delta r^2 \rangle = 6Dt$ и Грина-Кубо $3D = \int_0^\infty \langle v(0)v(t) \rangle dt$, где $\langle \Delta r^2 \rangle$ и $\langle v(0)v(t) \rangle$ – средний квадрат смещения и автокорреляционная функция скоростей центров масс молекул соответственно, t – время. Коэффициент вязкости $\eta_{\alpha\beta}$ рассчитан через соотношение Грина-Кубо $\eta_{\alpha\beta} = (V/k_B T) \int_0^\infty \langle \sigma_{\alpha\beta}(0)\sigma_{\alpha\beta}(t) \rangle dt$, где V – объем системы, k_B – постоянная Больцмана, T – температура, $\langle \sigma_{\alpha\beta}(0)\sigma_{\alpha\beta}(t) \rangle$ – автокоррелятор поперечных компонент тензора вязких напряжений, α и β – направления x, y, z . Усреднения $\langle \Delta r^2 \rangle, \langle v(0)v(t) \rangle, \langle \sigma_{\alpha\beta}(0)\sigma_{\alpha\beta}(t) \rangle$ проводятся как по статистически независимым участкам одной равновесной траектории, так и по траекториям, заданным с разными начальными условиями.

В атомных системах (например, в жидком аргоне) автокорреляционная функция компонент тензора напряжений имеет плавно спадающий к нулю вид. В исследуемой жидкости наблюдаются осцилляции автокоррелятора, вызванные наличием связей в молекулах. Проведен Фурье анализ полученной функции и выявлен пик на частоте колебаний молекулярной связи.

Количество частиц в потенциале объединенного атома при одинаковом размере системы меньше, чем в полноатомном подходе. Следовательно, в первой модели движение центров масс молекул менее затруднено и “сила трения” между частицами меньше. В связи с этим значение коэффициента диффузии, рассчитанное в модели TraPPE, получается завышенным, а коэффициента вязкости заниженным по сравнению с DREIDING и OPLS.

Работа поддержана грантом № 14-50-00124 Российского научного фонда.

1. Kondratyuk N.D., Lankin A.V., Norman G.E., Stegailov V.V. // J. Phys. Conf. 2015.
2. Mayo S.L., Olafson B.D., Goddard III W.A. // J. Phys. Chem. 1990. V. 101. P. 8897.
3. Damm W., Frontera A., Rives J.T., Jorgensen W.L. // J. Comput. Chem. 1997. V. 18. P. 1955.
4. Martin M.G., Siepmann J.I. // J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102. P. 2569.

СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КАРБИДЕ БОРА ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Коротаев П.Ю.* , Покаташкин П.А., Янцкин А.В.

ВНИИА, Москва,

*korotaev@vniia.ru

Поведение карбида бора B₄C при негидростатическом сжатии исследовано методом квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности. Установлено, что изменения структуры существенно зависят от степени негидростатичности, которая определялась как разница компонент тензора напряжений в направлениях вдоль и поперёк трёхатомной цепочки. Если степень негидростатичности не превышает 95 ГПа, наблюдается скачкообразный обратимый изгиб трёхатомной цепочки, приводящий к падению давления. При превышении этого критического значения происходит разупорядочение структуры, сопровождающееся переходом в квазигидростатический режим.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ УРАНА И МОЛИБДЕНА

Костюченко Т.С.* , Куксин А.Ю.

ОИВТ РАН, Москва,

*tatiana.s.kostyuchenko@gmail.com

Процессы диффузии играют важную роль в поведении материалов под воздействием радиационного облучения. Поэтому диффузия активно исследуется для перспективных топливных материалов, в том числе для сплавов урана и молибдена. При измерении коэффициента самодиффузии в гамма-уране была обнаружена аномально высокая диффузионная подвижность в сравнении с другими металлами с объемно-центрированной кубической решеткой

[1,2]. Однако механизмы диффузии в сплавах урана все еще не до конца исследованы. В данной работе рассматриваются проявления вакансионного и межузельного механизмов при самодиффузии и взаимной диффузии в сплавах урана и молибдена.

В работе представлена модель взаимной диффузии, основанная на данных о межузельных и вакансионных механизмах, причем все параметры модели рассчитаны в рамках атомистического моделирования. Также проведен анализ основных приближений, используемых при описании взаимной диффузии.

В разрабатываемой модели рассматривается одномерная диффузионная зона на границе объемноцентрированных кубических фаз урана и молибдена. Изменение концентраций в расчетных областях определяются направленными потоками компонент. Сами потоки зависят от градиента концентрации и коэффициента диффузии соответствующего типа атомов. В свою очередь коэффициенты диффузии атомов зависят от концентраций и подвижностей дефектов. Локальные концентрации дефектов рассчитываются также из уравнений диффузии для дефектов, включающих в себя потоки за счет градиента концентраций и потоки химической диффузии, связанной с разностью энтальпии образования дефектов.

Зависимость энтальпии образования межузелий и вакансий от концентрации компонентов была получена на основе статических расчетов. В равновесии преобладает межузельный вклад в коэффициент самодиффузии для сплавов с концентрацией урана более 60 ат. %. Также на основе МД моделирования определена зависимость энергии миграции дефектов от концентрации урана. Почти во всем диапазоне концентраций энергия миграции урана меньше, чем молибдена. Проводится сравнение результатов расчетов коэффициентов самодиффузии и взаимной диффузии с имеющимися экспериментальными данными [1-3].

В литературе [4] обсуждается, что при переходе к наноразмерным масштабам диффузионной зоны следует ожидать, что взаимная диффузия будет описываться в рамках феноменологического подхода Назарова-Гурова, а не теорией Даркена. Последняя основывается на предположении о локально равновесных концентрациях дефектов. МД моделирование взаимной диффузии показывает, что при наличии неоднородной концентрации компонентов дефекты очень быстро перераспределяются так, что их локальные концентрации определяются локальной энергией образования дефекта. Анализ проведенных расчетов позволяет проводить вычисления коэффициентов диффузии также и в неравновесном наномасштабном случае.

На основании представленной модели планируется определить возможность детектирования механизма диффузии по форме концентрационных профилей компонент.

Для расчетов применялся межатомный потенциал из работы [5] в формате модели погруженного атома с учетом угловых зависимостей.

1. Bochvar A.A., Kuznetsova V.G., Sergeev V.S. in Lectures of Soviet Scientists, Atomizdat, Moscow, 1959, p.370.
2. Peterson N.L., Rothman S.J. Phys. Rev., 1964, v. 136, p. A842.
3. Ke Huang, Dennis D. Keiser Jr., and Yongho Sohn. Metallurgical and Materials Transactions A., 02 October 2012.
4. А.М.Гусак, А.О.Богатырев и др. Моделирование твердофазных реакций, 2014.
5. Смирнова Д.Е., Куксин А.Ю., Стариков С.В. и др. Физика металлов и металловедение, 2015, т. 116, №3, с. 1-11.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ ГРАФИТА ПРИ НАНО- И ПИКОСЕКУНДНОМ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

*Красюк И.К.^{*1}, Бажулин А.П.¹, Беликов Р.С.², Семенов А.Ю.¹, Розмей О.Н.³,
Стучебрюхов И.А.¹, Томут М.³, Фортвов В.Е.², Хищенко К.В.²*

¹ИОФ РАН, Москва, ²ОИВТ РАН, Москва, ³GSI, Darmstadt,

*krasyuk99@rambler.ru

На лазерных установках “Камертон-Т” (ИОФ РАН, Москва, Россия) и PHELIX (GSI, Дармштадт, Германия) проведены эксперименты по изучению явления откола в мишенях из графита при нано- и пикосекундной длительности ударно-волнового воздействия. В диапазоне скоростей деформирования от 10^6 до 10^7 1/с впервые получены данные о динамической механической прочности этого материала на разрыв (откол). При максимальной реализованной скорости деформирования 10^7 1/с достигнута величина откольной прочности 2.1 ГПа, что составляет ~64% от теоретического предела прочности графита. Откол наблюдался не только на тыльной стороне мишени, но и на ее облучаемой (лицевой) поверхности. С помощью оптического и сканирующего электронного микроскопов изучена морфология лицевых и тыльных поверхностей исследованных мишеней. Методом комбинационного рассеяния света исследована структура графита как в области лазерного воздействия на лицевой поверхности мишени, так и на ее тыльной стороне в зоне откола. Проведено сравнение динамической прочности графита с динамической прочностью синтетического алмаза.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СКОРОСТИ РАЗВИТИЯ ТРЕЩИНЫ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРУЖЕНИИ

Кривошеев С.И.^{}, Магазинов С.Г.*

СПбГПУ, Санкт-Петербург,

**ksi.mgd@gmail.com*

Способность материалов выдерживать большие импульсные нагрузки подтверждена многочисленными работами, но исследования процессов разрушения по-прежнему представляют большой интерес, как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Сложность описания процесса разрушения определяется влиянием многочисленных факторов и особенностей, зависящих от характеристик материала, параметров воздействия, многообразия вида и структур силовых полей при испытаниях. Использование методов молекулярной динамики и атомистических подходов к описанию процессов разрушения позволяет учесть совокупность физических процессов, сопровождающих разрушение материала. Однако, результаты моделирования должны быть сопоставлены с экспериментальными данными по реальному поведению материала.

Развитие трещины является процессом, для адекватного описания которого необходим учет максимального числа действующих факторов, особенно в условиях импульсного нагружения. Визуализация этого процесса при

полной определенности в параметрах воздействия позволит получить данные для верификации моделей. Процесс разрушения образцов с макродефектами типа трещин нагружаемых по моде I равномерно распределенным по берегам трещины импульсным давлением микросекундной длительности, создаваемым магнитно-импульсным способом [1], исследовался с использованием скоростной камеры типа СФР-2, собранной в режиме фотохронографа. Схема оптической регистрации аналогична примененной в [2]. Опыты проводились на образцах, размеры которых обеспечивали формирование ударно-волновой структуры поля напряжений. Для образцов из ПММА начальная скорость развития трещины V_{cr} линейно связана с превышением амплитуды импульса давления P_{cr} порогового значения P_0 : $V_{cr} \approx 2,67 \cdot 10^{-6} \cdot (P_{cr} - P_0)$, размерность параметров в системе СИ. Пороговая амплитуда разрушающей нагрузки для импульса длительностью $\sim 5,2$ мкс определена с точностью не ниже 10% и равна 94,7 МПа. Анализ результатов экспериментальных исследований, проведенных в различных схемах нагружения при реализации ударно-волновой структуры поля напряжений, позволяет выделить некоторые общие закономерности процесса разрушения:

- процесс разрушения имеет пороговый характер, как при разрушении бездефектных образцов (откольная схема нагружения), так и образцов с макродефектами типа трещин;
- имеет место зависимость длины проросшей трещины от амплитуды импульса;
- амплитуды пороговых импульсов зависят от их длительности;
- при нагружении пороговыми импульсами имеет место задержка начала разрушения;
- стартовая скорость трещины линейно зависит от превышения амплитудой импульса порогового значения.

1. Кривошеев С.И. Магнитно-импульсная методика тестирования материалов при импульсном нагружении // ЖТФ, 2004, том 75, вып. 3, с. 47-53.
2. Березкин А.Н., Кривошеев С.И., Уткин А.А., Петров Ю.В. Эффект запаздывания старта трещины при пороговых импульсных нагрузках // Доклады РАН т.375, №3, 2000, С. 328-331.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ЯДЕРНОГО DD СИНТЕЗА В КОМПАКТНОМ ВАКУУМНОМ РАЗРЯДЕ С ДЕЙТЕРИРОВАННЫМ Pd АНОДОМ

Курilenков Ю.К. , Карпухин В.Т., Гуськов С.Ю.*

ОИВТ РАН, Москва,

**yukurilenkov@rambler.ru*

Ранее были продемонстрированы генерация быстрых ионов и DD нейтронов в межэлектродном пространстве наносекундного вакуумного разряда малой энергии (~ 1 Дж) с дейтерированным Pd анодом [1]. Моделирование эксперимента, проведенное методом частиц с использованием электродинамического кода КАРАТ, выявило принципиальную роль образования виртуального катода (ВК) и соответствующей ему глубокой потенциальной ямы (ПЯ) в межэлектродном пространстве [1,2]. Фактически, ПЯ играет роль микроускорителя в выбранной схеме разряда. Дейтроны (ионы D^+) захватываются в ПЯ и ускоряются её полем до энергий в десятки кэВ, что и обеспечивает DD синтез на встречных столкновениях дейтронов на оси разряда [2]. В частности, дейтроны в ПЯ могут совершать высокочастотные (~ 80 МГц) гармонические колебания, периодически коллапсируя на дне ПЯ, что будет сопровождаться соответствующим пульсирующим режимом выхода DD нейтронов. Частота этих колебаний совпадает с экстраполяцией выражений, полученных для предложенной в Лос-Аламосе, LANL (но не реализованной для ядерного синтеза) схемы инерционного электростатического удержания (ИЭУ) с периодически осциллирующими плазменными сферами (ПОПС) [3]. Частичное или полное запираение быстрых дейтронов межэлектродными ансамблями дейтерийсодержащих кластеров, наблюдаемое в эксперименте, может заметно увеличить нейтронный выход (до $10^7/4\pi$) [2]. Представляет отдельный интерес менее изученная самая начальная стадия разряда (1-3 нс), на которой времяпролётные измерения иногда также указывают на выход DD нейтронов. Поскольку наполненный дейтерием палладий является потенциальным накопителем энергии [4], можно предположить, что микротрещины, поры, дислокации (заполненные дейтерием) вблизи поверхности Pd анода образуют собой естественный массив микроканалов для микросинтеза под действием пучка автоэлектронов с катода [3]. Морфология поверхности Pd анода указывает на возможную ядерную природу анодных эктонов (взрывных центров) [2]. С другой стороны, требует анализа и DD синтез в объёмах анода (с учётом влияния Pd решётки и свободных электронов металла [5]), возможно «запускаемый» воздействием электронного пучка на весь Pd анод на самой начальной стадии разряда. В перспективе, этот нетривиальный процесс может быть предметом отдельного атомистического моделирования.

Работа поддержана грантом Российского Научного Фонда № 14-50-00124

1. Yu.K. Kurilenkov, M. Skowronek and J.Dufty. J.Phys.A:Math_Gen 39 4375 (2006); Plasma Physics Reports, 36, No. 13 (2010) 1219-1234; Yu.K. Kurilenkov, V.P.Tarakahov et al. J.Phys.A: Math_Theor 42 214041 (2009)
2. Yu.K. Kurilenkov, V.P.Tarakanov et al. Contrib. Plasma Phys. 51, № 5, 427 – 443 (2011)
3. R.A. Nebel and D.C. Barnes, Fusion Technology 38, 28 (1998); J. Park, R.Nebel et al. Physics of Plasmas 12 (2005) 05631.
4. Pundt A and Kirchheim R 2006 Annual Review of Materials Research 36 555–608
5. Tsyganov E N, Bavizhev M D et al 2015 Nucl.Instr. Meth. Phys. Res. B 355 333-339

РЕКОМБИНАЦИЯ В ПЛОТНОЙ ИОННОЙ ПЛАЗМЕ

Ланкин А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

Alex198508@yandex.ru

В работе представлены результаты для скорости рекомбинации в ионной плазме, полученные обработкой данных экспериментальных исследований послесвечения газового разряда в среде элегаза. Показано замедление ско-

рости рекомбинации в таких средах по сравнению со стандартными соотношениями для идеальной плазмы. Величина замедления возрастает по мере роста значения параметра неидеальности. При анализе механизма этого явления установлен ряд особенностей рекомбинации в неидеальной ионной плазме. Была построена молекулярно-динамическая модель, эффективно учитывающая столкновения заряженных частиц с нейтральной компонентой системы. Её использование позволили подтвердить применимость модели (Ланкин, 2008) подавления рекомбинации в неидеальной плазме вследствие формирования зоны многочастичных флуктуаций, разделяющей области свободных заряженных частиц и парных состояний для описания ионной плазмы, формирующейся в послесвечении разряда в элегазе. В её рамках константа скорости рекомбинации может быть описана как:

$$k'(P, T, \Gamma) = \begin{cases} k_0(T) & \text{for } \Gamma < \Gamma_0 \\ \beta \cdot k_0(T) \exp[-A/2(2\Gamma + \Delta/T)] & \text{for } \Gamma > \Gamma_0 \end{cases}$$

где k_0 – константа скорости рекомбинации в пределе идеальной плазмы, Δ – дополнительный вклад ион-молекулярного взаимодействия в ширину области многочастичных флуктуаций, Γ_0 – точка смены механизма рекомбинации, A – параметр модели, β – определяется из условия непрерывности функции.

При этом параметр неидеальности Γ_0 , при которой происходит смена механизмов рекомбинации в ионной плазме оказывается меньше, чем в электрон-ионной плазме из-за увеличения ширины области многочастичных флуктуаций в результате взаимодействия ионов с нейтральными молекулами. Кроме того, несколько уменьшается значение параметра A из-за большей вероятности рассеивания на большие углы для ион-молекулярных столкновений по сравнению с электронно-электронными, что подтверждается результатами молекулярно-динамического моделирования.

Работа поддержана грантом Российского Научного Фонда №14-50-00124.

ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ И ВРЕМЕННЫЕ СВОЙСТВА СОЛЬВАТАЦИИ ИОНА И ЕЁ ВЛИЯНИЕ НА ЕГО ДИФФУЗИЮ В ПРОСТОЙ ЖИДКОСТИ

Ланкин А.В.¹, Норман Г.Э.¹, Орехов М.А.*²

¹ОИВТ РАН, Москва, ²МФТИ, Долгопрудный,

*mo2411@mail.ru

Найдены сольватные оболочки иона, его автокорреляционная функция скорости и коэффициент диффузии. Рассмотрены взаимосвязи между ними.

В качестве модельной системы рассматривается одиночный ион в кубической системе атомов жидкости. Взаимодействие иона с атомами жидкости описывается потенциалом $U(r) = (E_0/2)((r_0/r)^{12} - 3(r_0/r)^4)$. Для описания взаимодействия атомов жидкости друг с другом используется потенциал Леннарда-Джонса. Расчёты проводятся методом классической молекулярной динамики с периодическими граничными условиями. Проверена сходимость результатов по числу атомов жидкости.

Расчёт парной корреляционной функции атомов вокруг иона показал образование пяти сольватных оболочек. Были рассчитаны времена жизни атомов на каждом слое кластера. Оказалось, что эти времена подчиняются экспоненциальному распределению со средними значениями на два порядка больше характерных времен колебаний кластера. Таким образом, кластер можно рассматривать как квазичастицу с массой, много большей массы иона.

Автокорреляционная функция скорости имеет колебательный характер. Показано, что эти колебания являются следствием собственных колебаний кластера и совпадают с ними по частоте. Для этого проведено непосредственное сопоставление спектра автокоррелятора и частоты колебаний кластера в линейном приближении.

Коэффициент диффузии иона D рассчитывался тремя методами: по формулам Грина-Кубо, Эйнштейна-Смолуховского и по подвижности при наложенной силе. Результаты совпали в пределах точности расчётов. Найдены зависимости D от параметров потенциала $U(r)$. Не обнаружена зависимость D от массы иона, что объясняется сольватацией.

При обсуждении результатов использовались аналитическое приближение [1] и формула Эйнштейна-Стокса $D = kT/C\eta R$, где η – сдвиговая вязкость жидкости, R – радиус кластера, C – константа, зависящая от типа граничных условий на границе кластера. Для независимой оценки R использовались рассчитанная парная корреляционная функция и приближение [1], в котором предполагается, что из-за поляризационного притяжения иона вокруг него возникает избыточное давление и жидкость кристаллизуется. Показано, что при малом r_0 диффузионные свойства существенно зависят от сольватации; зависимость коэффициента диффузии от параметров потенциала $U(r)$ хорошо описывается с использованием данной модели. При росте r_0 выше 2.5Å наблюдается отклонение от этой зависимости и уменьшение радиуса кластера.

Результаты молекулярно динамических расчетов и оценок в приближении кристаллического кластера согласуются с экспериментами по определению подвижности ионов $(O_2)^-$ [2] и $(Ar_2)^+$ [3,4,5,6] в жидком аргоне.

Работа поддержана грантом Российского Научного Фонда №14-50-00124.

1. Hilt O., Schmidt F., Khrapak A. // IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul. 1994. V.1. P.648.
2. Davis H., Rice S., Meyer L. // J. Chem. Phys. 1962. V.37. P.2470.
3. Henson B. // Phys. Rev. 1964. V.135. P.1002.
4. Gee N., Floriano M., Wada T. et al. // J. Appl. Phys. 1985. V.57. P.1097.
5. Rutherford J., Walker R. // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V.404. P.12016.
6. Rutherford J., Walker R. // NUCL. INSTRUM. METH. A 2015. V. 776. P.65.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОНДЕНСАЦИИ

Ленёв Д.Ю.

ОИВТ РАН, Москва,

lenevdy@mail.ru

Процессы образования, роста и испарения кластеров железа, углерода и воды исследуют в ряде экспериментов. Работа [1] посвящена методу Ti-Re LII (Time-Resolved Laser-Induced Incandescence). Он заключается в облучении

образца коротким импульсом лазера и измерением спектра излучения образца. На основе полученного спектра определяется размер наночастиц. Ti-Re ЛП также использовался в [2] как один из методов измерения размеров наночастиц железа наряду с измерением спектра поглощения и методом электронной эмиссии. Для интерпретации результатов эксперимента авторам [1] и [2] требуется коэффициент термической аккомодации, так как этого требует метод Ti-Re ЛП. Рассмотрены (в том числе экспериментально) все стадии образования и роста наночастиц железа, вызванного фотолизом молекул Fe(CO)₅: нуклеацию (образование кластеров), коагуляцию (слипание кластеров) и поверхностный рост (присоединение кластеров к более крупным образованиям). Было получено, что эффективность отвода энергии, влияющая на скорость процесса, зависит от коэффициента термической аккомодации. Авторы [1] привлекают ММД для вычисления этого коэффициента. Основа молекулярно-кинетического подхода – в выводе вероятностей прилипания атома к кластеру и испарения.

Настоящая работа является логическим продолжением работы [3]. Она отличается от неё рассмотрением другой системы, другими размерами кластеров и рассмотрением также коэффициента термической аккомодации, а не только коэффициентов прилипания и отражения. В отличие от [1], рассматривался сферический кластер и измерена зависимость от прицельного параметра. Начальные условия были выбраны с использованием метода Монте-Карло. Исследована температурная зависимость обоих коэффициентов, оказавшаяся аррениусовской для жидкого кластера. Измерения были сделаны для 3 размеров кластера. Было проведено сравнение результатов с другим методом моделирования [1] и экспериментом [2]. Поскольку было получено удовлетворительное сходство, они могут быть использованы для вычисления размеров наночастиц [1] и лучшего понимания процесса конденсации и нуклеации в переохлажденном паре.

Работу можно расширить довольно многими способами. Во-первых, можно сравнить получаемые характеристики для разных потенциалов. Во-вторых, можно изменить состав системы. Это подразумевает под собой не только замену железного пара на пар другого металла, но можно рассмотреть также водяной пар, чему можно найти применение в метеорологии. Особый интерес представляют также системы из нескольких компонент, поскольку примеси служат центрами нуклеации и значительно ускоряют её скорость.

Выражаю благодарность Г. Э. Норману за предложенную тему и руководство.

Работа поддержана грантом Российского Научного Фонда №14-50-00124.

Литература:

1 Daun K., Sipkens T.A., Titantah J.T. and Karttunen M. Thermal Accommodation Coefficients for Laser-Induced Incandescence Sizing of Metal Nanoparticles in Monatomic Gases, - J. Appl. Phys. – 2013 - В. 8. – P. 409-420.

2 Eremin A.V., Gurentsov E.V., Priemchenko K.Y. Iron particle growth induced by Kr-F excimer laser photolysis of Fe(CO)₅ // J. of Nanoparticle Research. - 2013. - V.15. № 6. 1537.

3 5 Insepov Z.A., Karataev E.M., Norman G.E. The kinetics of condensation behind the shock front. Z.Phys. D – Atoms, Molecules and Clusters. - 1991. - V.20. - P.449-451

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ НУКЛЕАЦИИ В РАСПЛАВАХ МЕТАЛЛОВ ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

Лопаницына Н.Ю. , Куксин А.Ю.*

ОИВТ РАН, Москва,

**lopanitsyna@phystech.edu*

В последнее время интенсивно исследуются возможности наноструктурирования поверхностей под воздействием субпикосекундных лазерных импульсов. В частности, в экспериментах [1] при облучении алюминия были получены относительно простые наноструктуры. Также интерес к металлам при больших отрицательных давлениях связан с явлением абляции, вызванного действием субпикосекундных лазерных импульсов на поверхность металла. В молекулярно-динамических [2,3] и гидродинамических [3] расчетах данного процесса наблюдаются плавление материала, растяжение расплава, появление и рост полостей в метастабильной жидкой фазе. Делаются попытки определить предельные напряжения, достижимые в расплаве при высокоскоростной деформации, на основе экспериментов с субпикосекундными лазерными импульсами [3].

В настоящей работе на основе молекулярно-динамического моделирования на примере алюминия, железа и молибдена исследуются характеристики метастабильного растянутого расплавленного состояния и анализируются процессы, происходящие при зарождении полостей. Все расчеты проводились с использованием пакета программ для атомистического моделирования LAMMPS, применялись межатомные потенциалы взаимодействия в форме потенциала погруженного атома.

На основе метода, описанного в [4], проведен расчет скорости зарождения полостей в зависимости от температуры (до 5000 К) и плотности расплавов: железа, алюминия, молибдена. Полученные данные были аппроксимированы с помощью классической теории нуклеации и классической теории нуклеации с использованием поправки Толмана, которая учитывает зависимость поверхностного натяжения σ от радиуса поры r : $\sigma = \sigma_0 / (1 + 2\delta/r)$. Из аппроксимаций $J(p, T)$ были найдены значения параметра Толмана для каждого потенциала межчастичного взаимодействия. Также длина Толмана была оценена из независимых молекулярно-динамических расчетов. Получена зависимость поверхностного натяжения от радиуса пузырька. Согласно результатам, параметр Толмана не зависит от температуры. В попытках найти связь между длиной Толмана и другими параметрами системы не удалось пронаблюдать зависимость от характерного межатомного расстояния, но удалось выявить зависимость длины Толмана для расплавов металлов от поверхностного натяжения плоской поверхности в пределе нулевой температуры.

Также была построена модель для определения прочности расплава металлов на разрыв. На основе полученных зависимостей частоты нуклеации от давления и температуры, а также уравнений состояния, была рассчитана зависимость прочности на разрыв от скорости деформации. В том числе было проведено сравнение данной модели и МД расчетов. Более того, было показано, что формула $p = (\sigma_0 p_0) / (\delta p_0 + \sigma_0)$ дает достаточно хорошую поправку к значению прочности p_0 без учета зависимости поверхностного натяжения от радиуса поры, которая согласуется с построенной моделью.

Все расчеты и анализ проведены в рамках нескольких модельных систем. Для описания динамической прочности реальных металлов рекомендуется использовать экспериментальные данные о поверхностном натяжении на плоской границе [5] и величину поправки Толмана из атомистического моделирования.

1. Ионин А.А. и др., Письма в ЖЭТФ, 2011, т. 94, с. 289-292.
2. Starikov S.V., Pisarev V.V., Journal of Applied Physics, 2015, v. 117, N. 13, p. 135901.
3. Агранат М.Б., Анисимов С.И., Ашитков С.И. и др., Письма в ЖЭТФ, 2010, т. 91, с. 517.
4. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Доклады академии наук, 2002, т. 386, № 3, с. 1-5.
5. Филиппов К.С. Физика и химия обработки материалов, 2011, № 1, с. 94–97.

КОРРЕЛЯЦИЯ ЛОКАЛЬНОГО ОБЪЕМА И ПЛАСТИЧЕСКИХ ПЕРЕСТРОЕК ПРИ ДЕФОРМАЦИИ СТЕКЛООБРАЗНЫХ ПОЛИМЕТИЛЕНА И ОЛИГОМЕРА 2,5,8-ТРИМЕТИЛДЕКАНА

*Мазо М.А.^{*1}, Стрельников И.А.¹, Балабаев Н.К.², Олейник Э.Ф.¹, Берлин А.А.¹*

¹ИХФ РАН, Москва, ²ИМПБ РАН, Пушкино Московской обл.,

*mikhail.mazo1@gmail.com

При рассмотрении физических процессов в неупорядоченных твердых телах широко распространено мнение, что кинетические перестройки любого типа обычно зарождаются и развиваются в структурах с избыточным локальным свободным объемом [1,2]. В этих областях стекла понижаются локальные механические свойства (жесткость, предел текучести, прочность) и повышается подвижность частиц, собственных или примесных, а также дефектов. Такая точка зрения распространяется и на неупругие деформационные процессы в стеклах, полимерные в частности [3]. Считается, что именно в местах с избыточным свободным объемом зарождаются элементарные пластические перегруппировки. В ряде работ этот вопрос анализировался с использованием молекулярного моделирования, но однозначного ответа так и не было получено [3].

Цель данной работы – исследовать связь между локальным объемом и локальными пластическими перестройками при изотермической низкотемпературной деформации в режимах одноосного растяжения или сжатия. Рассматривались две системы: полноатомная модель полиметилена [4] и система из 1000 молекул олигомера 2,5,8-триметилдекана C₁₃H₂₈ в приближении объединенных атомов [5]. Локальный объем в обеих системах рассчитывался как объем многогранников Вороного для каждой частицы. Локальную пластическую деформацию в стекле характеризуют неаффинными смещения атомов при деформации [6].

Обнаружено, что коэффициенты линейной корреляции между величинами неаффинных смещений атомных групп и соответствующими объемами их многогранников Вороного для обеих рассмотренных систем были очень малы – 0.1. Однако, если рассматривать группы частиц с близкими значениями неаффинных смещений в некотором интервале деформаций, то как при сжатии, так и при растяжении для обеих систем эти смещения хорошо коррелируют со средним по группе объемом многогранников Вороного: большие смещения наблюдаются у частиц, имеющих в среднем большой локальный объем.

Таким образом, увеличение локального объема в стекле действительно способствует зарождению и развитию пластических деформаций, но это не единственный, а, возможно, даже не основной параметр, который определяет область возникновения перестроек при деформации стекла. По-видимому, при анализе механических свойств полимерных стекол на столь малых масштабах порядка 1-2 нм их структуру правильнее рассматривать как конструкцию, а не однородную среду. В этом случае, опираясь на такие макроскопические параметры, как локальный объем или локальный тензор напряжений можно лишь с некоторой вероятностью локализовать места возникновения пластической перестройки при внешней нагрузке.

1. Fox T.G. Jr., Flory P.J. // J. Appl. Phys. 1950. V.21. No6. P.581.
2. Turnbull D., Cohen M.H. // J. Chem. Phys. 1970. V.52. No6. P.3038.
3. Argon A.S. The Physics of Deformation and Fracture of Polymers. New York: Cambridge Univ. Press, 2013.
4. Стрельников И.А., Мазо М.А., Балабаев Н.К., Олейник Э.Ф. // Высокомолекул. соед. А. 2014. Т.56. №4. С.427.
5. Берлин Ал.Ал., Мазо М.А., Стрельников И.А., Балабаев Н.К. // Все материалы. Энциклопед. справ. «Наука и технологии». 2014. №11. С.2.
6. Falk M.L., Langer J.S. // Phys. Rev. E. 1998. V57. No6. P.7192.

НЕСТАЦИОНАРНАЯ РЕЗОНАНСНАЯ ДИНАМИКА ОСЦИЛЛЯТОРНЫХ ЦЕПЕЙ: АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Маневич Л.И.

ИХФ РАН, Москва,

manevitchleonid3@gmail.com

В докладе представлена новая концепция предельных фазовых траекторий (ПФТ), позволяющая адекватно описать широкий класс существенно нестационарных процессов в классических и квантовых системах. Предельные фазовые траектории являются фундаментальными нестационарными процессами, которые характеризуются максимально возможным энергообменом между различными частицами системы (областями когерентности). Они играют в существенно нестационарной динамике конечных моделей роль, аналогичную роли нелинейных нормальных мод в стационарной теории.

Приложении концепции ПФТ включают ряд важных проблем механики, физики твердого тела, фотоники, физики полимеров и биофизики, о которых можно судить по содержанию основных публикаций по теме: «New approach to beating phenomenon in coupled nonlinear oscillatory chains» [1], «Limiting phase trajectories and the origin of energy localization in nonlinear oscillatory chains» [2], «Non-smooth approximations of the limiting phase trajectories for the Duffing oscillator near 1:1 resonance» [3], «Tractable Models of Solid Mechanics. Formulation, Analysis and Interpretation» [4], «Предельные фазовые траектории и динамические переходы в нелинейных периодических системах» [5], «Classical analog of quasilinear Landau-Zener tunneling» [6], «Non-conventional synchronization of weakly coupled active oscillators» [7], «Localization of low-frequency oscillations in single-walled carbon nanotubes» [8], «Dynamical of a linear oscillator coupled to a bistable light attachment: Analytical study» [9], «Связанные осцилляторы на упругой подложке в условиях акустического вакуума» [10].

Аналитические результаты, полученные с использованием этой концепции, подтверждаются данными компьютерного моделирования.

1. Manevitch L.I. // Arch. Appl. Mech. 2007. V.77. P.301.
2. Manevitch L.I., Smirnov V.V. // Phys. Rev. E. 2010. V.82. No3. P. 036602.
3. Manevitch L.I., Kovaleva A.S., Shepelev D.S. // Physica D. 2011. V.240. No1. P.1.
4. Manevitch L.I., Gendelman O.V. Tractable Models of Solid Mechanics. Formulation, Analysis and Interpretation. New York: Springer, 2011.
5. Смирнов В.В., Маневич Л.И. // Акустический журнал. 2011. Т.57. №2. С. 279.
6. Manevitch L.I., Kovaleva A.S. // Phys. Rev. E. 2012. V.85. P.016202.
7. Manevitch L.I., Kovaleva M.A., Pilipchuk V.N. // Europhys. Lett. 2013. V.101. No5. P. 50002.
8. Smirnov V.V., Shepelev D.S., Manevitch L.I. // Phys. Rev. Lett. 2014. V.113. P. 135502.
9. Manevitch L.I., Sigalov G., Romeo F., Bergman L.A., Vakakis A. // J. Appl. Mech. 2014. V.81. No4. P. 041011.
10. Кикоть И.П., Маневич Л.И. // Нелинейная динамика. 2014. Т.10. №3. С.245.

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА ПРИ КРИОГЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Николаев В.С. , Бедрань З.В., Тимофеев А.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

**vladiorussia@mail.ru*

Пылевая плазма представляет собой ионизованный газ, содержащий частицы конденсированного вещества. Она обладает уникальными свойствами, например: большим по величине зарядом пылевых частиц, термодинамической открытостью, способностью к самоорганизации и формированию различных структур и т.д. В отличие от обычной материи, в которой причиной связи частиц друг с другом часто являются квантовые эффекты (как, например, в атоме водорода), в пылевой плазме существуют структуры с классическими связями, являющиеся предметом интенсивных исследований. Пылевая плазма широко распространена в природе и активно используется в производстве. Ее особые свойства наиболее хорошо проявляются при криогенных температурах, однако технологические трудности долго препятствовали прогрессу работ в этом направлении. Впервые экспериментально упорядоченные системы пылевых частиц удалось наблюдать в середине 90-х годов в плазме высокочастотного разряда вблизи границы прикатодной области, в работе Асиновского и др. [1] наблюдалось плотное пылевое образование из полидисперсных частиц в разряде постоянного тока, охлаждаемом жидким гелием (4,2 К), в работе Фортова [2] наблюдались структуры полидисперсных частиц в разрядах, охлаждаемых жидким азотом (77 К), а в работе Антипова [3] в разрядах, охлаждаемых жидким гелием и азотом, исследовались различные свойства плотных пылевых структур при сверхнизких температурах.

В данной работе представлены результаты обработки экспериментальных данных, полученных группой Р.Х. Аморова в 2010-2012 гг в ОИВТ РАН. Описано устройство использовавшейся экспериментальной установки. Представлен созданный экспериментаторами программный комплекс для автоматизации сбора данных. Разработаны и описаны методики измерения межчастичного расстояния по видеофрагменту. Снята экспериментальная кривая зависимости расстояния между частицами от температуры стенки газоразрядной трубки в диапазоне температур 9-290 К. Получено распределение использовавшихся в эксперименте пылевых частиц по размеру и параметру асимметрии. Построены экспериментальные зависимости параметров разряда (ток, напряжение, давление) друг от друга. Исследована применимость различных теоретических моделей к условиям проведенных экспериментов. Обоснован выбор теоретической модели, основанной на малости размера пылевых частиц по сравнению с длиной экранирования и малости отношения температур ионов и электронов. Получены теоретические зависимости межчастичного расстояния от температуры нейтралов в рамках сделанных предположений с использованием потенциала Дебая и потенциала Гуревича. Исследован ионный состав гелиевой плазмы в области криогенных температур. Найдены приближенные зависимости параметров разряда (ток, напряжение, давление, концентрация частиц) друг от друга. Произведена оценка заряда пылевых частиц и оценка величины поля страты. Произведено сравнение экспериментальных кривых и теоретических зависимостей для межчастичного расстояния.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01295).

Список литературы:

1. V. E. Fortov, L. M. Vasilyak, S. P. Vetchinin, V. S. Zimnukhov, A. P. Nefedov†, and D. N. Polyakov. Plasma-Dust Structures at Cryogenic Temperatures. - Doklady Physics. – 2002. - Vol. 47, No. 1 - pp. 21–24
2. L. M. Vasilyak, D. N. Polyakov, and V. V. Shumova. Dust Particles Influence on Cryogenic Plasma of Glow Discharge in Neon. – 2011. - AIP Conference Proceedings 1397, 401.
3. Asinovskii E.I., Kirillin A.V., Markovets V.V. Phys. Lett. A. - 2006 - № 350 - P.126
4. Fortov V.E. et al. Phys. Usp.- 2011 - № 47 — P. 447
5. Антипов С.Н. и др. Плазменно-пылевые структуры в тлеющем разряде постоянного тока при криогенных температурах. - ЖЭТФ. - 2011. - № 3 — С. 554

ПЛАЗМЕННЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД

Норман Г.Э. , Саитов И.М., Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

**genri.norman@gmail.com*

Плазменный фазовый переход предсказан теоретически [1, 2]. Гипотеза инициировала значительное число теоретических работ, см., например [3, 4]. Много позже получены экспериментальные указания [5-8]. Цель как [5], так [6] - установить скачок плотности, который разделяет две фазы разогретого плотного водорода. В [7] на двух длинах волн обнаружен скачок коэффициента отражения как указание на фазовый переход и проведена граница проводящего флюида водорода. Тройная точка флюид-флюид-твёрдое тело предложена для расплава водорода (дейтерия) [6, 7]. Новые экспериментальные данные получены для плотного разогретого дейтерия [8].

Фазовый переход жидкость-жидкость в расплаве селена наблюдался экспериментально [9,10] в области тройной точки недалеко от экстремума линии плавления. За открытием [9] последовали аналогичные наблюдения для других веществ. Переходы [9] и [1,2] выглядят принадлежащими к одной и той же линии сосуществования фаз. Второй проявляется в частично ионизованной области ближе к критической точке. Такая линия фазового равновесия предсказана в [1,2].

Природа перехода Бражкина была заявлена как переход полупроводник-метал [9]. Две фазы плазменного фазового перехода различались степенью ионизации в [1, 2]. Квантовое моделирование *ab initio* предлагается использовать, чтобы проверить идеи, которые мотивировали как [1, 2], так и [9] и рассмотреть разницу и сходство между переходами Бражкина и Нормана-Старостина и отличие от металлизации Вигнера. Плотность состояний электронов и характерная щель в ней исследуется, чтобы подтвердить переход полупроводник-метал [9] вблизи тройной точки. Изменение плотности состояний с ростом плотности при постоянной температуре рассчитано для селена.

Понятия “степень ионизации” и “свободные электроны” теряют смысл в неидеальной плазме. Электронные состояния нельзя уже классифицировать как только свободные и связанные даже условно, как в идеальной плазме. Широкая область промежуточных многочастичных нестационарных состояний флуктуационной природы образуется между свободными и связанными [11]. Область имеет диффузные границы и расширяется с ростом плотности, связанные состояния исчезают. Более того, концентрация свободных электронов вообще не является наблюдаемой величиной. Предлагается использовать плазменную частоту, чтобы характеризовать разницу фаз вдоль кривой сосуществования в разогретом плотном водороде. Развита метод расчёта плазменной частоты, а также проводимости и коэффициента отражения для таких сред [12, 13]. Метод позволяет рассчитать как все диэлектрические свойства, так и плотность состояний электронов самосогласованным образом. Найден скачок плазменной частоты в разогретом плотном водороде. Он указывает на плазменную природу фазового перехода. Рассчитаны также скачок проводимости, плотность состояний электронов и парная функция распределения ионов. Изменение последней указывает на изменение ионной структуры, согласованное с изменением электронной.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01295).

1. Г.Э.Норман, А.Н.Старостин. ТВТ. 6, 410 (1968); 8, 413 (1970).
2. Г.Э.Норман, А.Н.Старостин. Ж. прикладной спектроскопии 13, 149 (1970).
3. W. Ebeling, G. Norman. J. Stat. Phys. 110, 861 (2003).
4. R. Redmer and G. Roepke, Contrib. Plasma. Phys. 50, 970 (2010).
5. V. Fortov, R. Ilkaev, V. Arinin, et al. Phys. Rev. Lett. 99, 185001 (2007).
6. V. Dzyabura, M. Zaghoo, I. Silvera. Proc Natl Acad Sci U S A. 110, 8040 (2013).
7. P. Loubeyre, P. Celliers, D. Hicks, et al. High Press. Res. 24, 25 (2004).
8. M. D. Knudson, M. P. Desjarlais, A. Becker, et al. Science, 348, 1455 (2015).
9. В. В. Бражкин, Р. Н. Волошин, С. В. Попова. Письма ЖЭТФ 50, 92 (1989).
10. В. В. Бражкин, А. Г. Ляпин. УФН, 170, 535 (2000).
11. A. Lankin, G. Norman. J. Phys. A 42, 214032 (2009); Contrib. Plasma Phys. 49, 723 (2009).
12. G. Norman, I. Saitov, V. Stegailov, P. Zhilyaev. Phys. Rev. E 91, 023105 (2015).
13. G. E. Norman, I. M. Saitov, and V. V. Stegailov. Contrib. Plasma Phys. 55, 215 (2015).

ПЛАВЛЕНИЕ ГРАФИТА: АТОМИСТИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА СОГЛАСОВЫВАЕТ ТЕОРИЮ И ЭКСПЕРИМЕНТ

*Орехов Н.Д., Стегайлов В.В.**

ОИВТ РАН, Москва,

**stegailov@gmail.com*

Одним из наиболее распространенных аллотропов углерода является графит — материал, нашедший, в силу своих уникальных теплофизических свойств, широкое применение в науке и технике. Однако, несмотря на длительный период изучения, экспериментальные данные по температуре плавления графита остаются противоречивыми и по сей день. Полученные в ряде работ температуры плавления лежат в широком диапазоне от 3800 до 5000 К, существенно превышающем погрешности отдельных экспериментов (подробный исторический анализ нескольких десятков работ, посвященных определению температуры плавления графита, приведен в [1]). Систематизация данных многих экспериментов, в частности, указывала на существование зависимости результатов измерения температуры плавления от скорости нагрева образцов, однако данный факт не получил удовлетворительного объяснения [2-3].

В данной работе [4] с помощью метода классической молекулярной динамики [5] исследована кинетика двух конкурирующих процессов в перегретом кристалле графита: гетерогенного плавления на границе кристалл-расплав и гомогенного плавления за счет спонтанного образования зародышей жидкой фазы.

Полученные результаты являются существенным аргументом в пользу того, что при $\dot{T} > 10^5 - 10^6$ К/с фактически детектируемые в экспериментах по импульсному нагреву «температуры плавления графита» являются, в действительности, температурами, при которых наблюдается распад перегретого метастабильного графита, и, таким образом, не являются в точном смысле слова термодинамическими температурами плавления. При сверхвысоких скоростях нагрева детектируемые в эксперименте температуры определяются температурой плавления отдельных графеновых слоев.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01487).

- [1] A.I. Savvatimskiy, Carbon, 2005, 43, 6, 1115–1142.
- [2] Э. И. Асиновский, А. В. Кириллин, А. В. Костановский, УФН, 2002, 172, 931–944.
- [3] I.I. Klimovskii, V.V. Markovets, ISJAE, 2007, 49, 5, 111–115.
- [4] N. D. Orekhov, V. V. Stegailov, Carbon, 2015, 87, 358 - 364.
- [5] S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison, J. Chem. Phys., 2000, 112, 14, 6472-6486.

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДГЕЗИОННЫХ СВОЙСТВ ИНТЕРФЕЙСА ПОЛИЭТИЛЕН - УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА

Орехов Н.Д. , Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

**nikita.orekhov@gmail.com*

Физические предпосылки, обеспечивающие упрочнение полимерных нанокомпозитов, на данный момент изучены достаточно слабо. Получение и разработка подобных материалов зачастую основана на эмпирических соображениях. Развитие индустрии нанокомпозитов нуждается в создании теоретических моделей, позволяющих установить связь между субмикронной структурой материала и его макропараметрами. В данной работе в рамках метода молекулярной динамики исследованы свойства полиэтиленовой матрицы, находящейся в контакте с углеродными нановключениями, такими как углеродные нанотрубки и графеновые пластины.

Работа выполнена при финансовой поддержке по гранту Российского Научного Фонда № 14-50-00124.

ИССЛЕДОВАНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ ВОЛНЫ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИФФУЗИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ

*Орешкин В.И.*¹, Чайковский С.А.¹, Лабецкая Н.А.¹, Орешкин Е.В.²*

¹ ИСЭ СО РАН, Томск, ² ФИАН, Москва,

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

На сильноточном генераторе МИГ (амплитуда тока до 2.5 МА, время нарастания тока 100 нс) проведены исследования роста крупномасштабных неустойчивостей при электрическом взрыве проводников в режиме скинирования тока. Эксперименты показали, что крупномасштабные неустойчивости с длиной волны 0.02-0.05 см появляются непосредственно после выхода на ось волны нелинейной диффузии магнитного поля. В рамках линейного приближения проведен анализ развития неустойчивостей. Показано, что при распространении по проводнику волны нелинейной диффузии неустойчивости с длиной волны порядка толщины проводника подавлены. При выходе на ось волны нелинейной диффузии инкременты неустойчивостей для всех длин волн резко возрастают. Проведены сравнения экспериментальных результатов с результатами численного моделирования.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, грант № 14-08-00524-а.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПУЧКА УБЕГАЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ ДЛЯ РАЗРЯДА В ВОЗДУХЕ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ

*Орешкин Е.В.*¹, Баренгольц С.А.², Чайковский С.А.², Орешкин В.И.²*

¹ ФИАН, Москва, ² ИСЭ СО РАН, Томск, ,

**bombom774@gmail.com*

Рассматривается модель, позволяющая описывать динамику быстрых электронов, инжектированных с головки анодонаправленного стримера. Модель основана на численном решении трехмерных уравнений движения электронов. В ней учитываются следующие процессы: ускорение электрона внешним полем; торможение электрона за счет неупругих столкновений, взаимодействие электрона с полем объемного заряда; рассеяние электрона при упругих взаимодействиях с молекулами газа (методом Монте-Карло). Предполагается, что стример представляет собой плазменный выступ, поверхность которого эквипотенциальна с поверхностью катода. На головке стримера электрическое поле усилено, благодаря чему для электронов, инжектированных с нее, реализуются условия для перехода в режим непрерывного ускорения. Работа выполнена при поддержке: РФФИ грант 15-38-20617 мол а вед, грант 13-08-01397 А; Стипендия президента Российской Федерации СП-1627.2013.1.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИМПУЛЬСНЫХ ПУЧКОВ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ С ЭНЕРГИЕЙ 10 МэВ, МОЩНОСТЬЮ ЗГВт И ДЛИТЕЛЬНОСТЬЮ 20 ПС НА КОНДЕНСИРОВАННЫЕ ТЕЛА В СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЙ УСТАНОВКЕ

*Павлов Ю.С.*¹, Ревина А.А.¹, Доброхотов В.В.¹, Сурма А.М.², Лагов П.Б.³, Климашин В.П.¹, Непомнящий О.Н.¹, Павлов В.А.¹, Даниличев В.А.¹*

¹ ИФХЭ РАН, Москва, ² ЗАО "Протон-Электротекс Орёл", ³ МИСиС, Москва,

**rad05@bk.ru*

Разработанная в ИФХЭ РАН спектрофотометрическая установка предназначена для исследования быстрых радиационных физико-химических реакций и их короткоживущих продуктов (время жизни от 10^{-1} до 10^{-12} с) при воздействии на конденсированные тела коротким импульсом ионизирующего излучения [1]. Получаемые на установке важные данные о структуре и свойствах перспективных для технологии веществ позволяют подтвердить результаты атомистического моделирования этих веществ. Ионизирующее излучение генерирует пучок электронов из разработанного в ИФХЭ РАН ускорителя с энергией 10 МэВ и током 300 А в импульсе длительностью менее 20 пс. [2]. Способ формирования пикосекундных импульсов в ускорителе основан на выделении поворотным электромагнитом одиночного сгустка электронов из пакета сгустков, состоящего из 6 сгустков и имеющего длительность $\sim 2,5$ нс [3]. Спектрофотометрическая установка основана на регистрации оптического поглощения анализируемого света в конденсированном теле, облученном электронным пучком с энергией 10 МэВ и длительностью 20 пс. В экспериментальной импульсной установке одновременно через образец пропускается световое излучение от ксеноновой лампы в направлении перпендикулярном к пучку электронов. Прошедший через образец свет с помощью зеркальной оптической системы разлагается на спектр и анализируется на спектрофотометрической диагностирующей установке. Полученные результаты позволили разработать способы электронно-оптической модификации оптических свойств кристаллов и оптических элементов, методы радиационной очистки кристаллов от примесей. Установка позволяет определять константы и скорости сверхбыстрых радиационно-химических реакций с участием

свободных радикалов, гидратированного и сольватированного электронов и возбужденных молекул в жидкостях. При коэффициенте экстинкции продуктов радиолитической жидкостей $10^3 \text{ дм}^3/\text{моль}\cdot\text{см}$ концентрация продуктов равна $10^{-4} \text{ моль}/\text{дм}^3$, что достаточно для регистрации продуктов по оптическому поглощению. Радиационный выход основных продуктов радиолитической жидкостей 3 молекулы/100 эВ поглощенной энергии. Плотность энергии $2 \cdot 10^{-18} \text{ эВ}\cdot\text{см}^{-3}$ соответствует дозе 300 Гр. Временное разрешение ограничено временем прохождения света в конденсированных телах.

Установка также используется в режиме генерации: - сверхкоротких импульсов нейтронов (спектра деления) с максимальным потоком $10^{18} \text{ н}/\text{с}$ за счет фотоделения на образце из U^{238} ; - моноэнергетических электронных импульсов малой длительности с плотностью потока $6 \cdot 10^{20} \text{ э}/\text{см}^2\cdot\text{с}$; - импульсного тормозного излучения малой длительности (со спектром близким к спектру деления) с мощностью тормозного излучения на расстоянии 1 м от мишени до $10^6 \text{ Гр}/\text{с}$. Такие режимы работы установки используются для исследования спектральных и временных характеристик детекторов ионизирующих излучений с очень низкой чувствительностью и для исследования радиационной стойкости материалов к импульсному воздействию.

От качества параметров экспериментальной пикосекундной спектроскопической установки зависит получение новых фундаментальных знаний в радиационной физике кристаллов и полупроводников; в области электронно-лучевого синтеза функциональных наноматериалов; радиационно-химических превращений материалов; радиационного катализа; в физике пучковой плазмы и метрологии быстропротекающих радиационных процессов.

1. Павлов Ю.С., Доброхотов В.В., Климашин В.П., Непомнящий О.Н. // В кн: Труды XXIV Международной конференции «Радиационная физика твёрдого тела». М.: Изд-во ФГБНУ «НИИ ПМТ», 2014, с. 526-535.
2. A.K. Pikaev, P.Ya. Glazunov, Yu.S. Pavlov. // Phys. Chem., 1993, Vol. 42. Nos 4-6, pp. 887-890.
3. Yu.S. Pavlov, V.B. Dobrohotov, V.A. Pavlov, O.N. Nepomnyaschy, V.A. // Proceedings of XXIV Russian Particle Accelerators Conference, 2014, Obninsk, Russia, pp. 259-261.

РЕТРОГРАДНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ

*Писарев В.В.**, *Норман Г.Э.*, *Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

**pisarevvv@gmail.com*

С помощью метода молекулярной динамики исследуется фазовая диаграмма смеси метан-бутан. Для моделирования используется параметризация межатомных взаимодействий TraPPE-UA (переносимый потенциал для фазовых равновесий – модель обобщенного атома). Рассматриваются модели свободного пространства и щелевой поры. Стенки поры моделируются потенциалом Леннарда-Джонса.

Получена форма изотермы фазового равновесия модельной системы при $T_{cr}(\text{CH}_4) < T < T_{cr}(\text{C}_4\text{H}_{10})$. Расчет для смеси в свободном объеме демонстрирует наличие области ретроградной конденсации, при этом хорошо воспроизводится экспериментальная зависимость растворимости метана в бутане от давления.

Введение стенок сдвигает фазовую диаграмму смеси, направление сдвига определяется смачиваемостью. Для несмачиваемой стенки характерно обогащение паровой фазы тяжелым компонентом, для смачиваемой – легким.

Обсуждается применение полученных результатов для описания процессов, протекающих при разработке газоконденсатных месторождений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-50-00124).

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ А-БОРА И КАРБИДА БОРА

*Покаташкин П.А.**, *Коротяев П.Ю.*, *Янилкин А.В.*

ФГУП «ВНИИА им. Н.Л. Духова», Москва,

**p.a.pokatashkin@gmail.com*

Карбид бора выделяется среди керамических материалов уникальным набором свойств: легкостью, высокой твердостью, высокой температурой плавления, а также термической устойчивостью.

В настоящее время не существует хорошей феноменологической модели разрушения карбида бора. В различного рода ударно-волновых экспериментах, при наноиндентировании наблюдается аморфизация, однако микроскопический механизм этого явления не ясен. Вышесказанное объясняет актуальность атомистического моделирования этих материалов. Ab initio методы, ввиду своей вычислительной сложности, не позволяют рассматривать крупномасштабные системы, а для молекулярно-динамического описания необходим потенциал межатомного взаимодействия для бора, которого не существовало. Следует отметить, что а-бор имеет схожую с карбидом бора структуру, их упругие свойства также близки. А поскольку он состоит из одного химического элемента, задача построения потенциала межатомного взаимодействия становится существенно проще, чем для карбида бора. Таким образом, результаты моделирования а-бора могут являться оценкой свойств карбида бора.

В ходе данной работы, проводилось квантовое молекулярно-динамическое моделирование (КМД) а-бора и карбида бора в широком диапазоне давлений и температур. На основе полученных конфигураций, методом согласования по силе (force-matching) были построены потенциалы межатомного взаимодействия, которые в дальнейшем использовались в крупномасштабных молекулярно-динамических (МД) расчетах.

Полученные потенциалы в форме Angular Dependent Potential (ADP) были верифицированы по имеющимся экспериментальным данным и первопринципным расчетам. Полученные значения длин связей, кривые изотермического сжатия, коэффициенты Грюнайзена и теплового расширения находятся в хорошем соответствии. В качестве примеров использования потенциала рассматривалось прохождение ударных волн и межзеренное трение. Поведение материалов качественно согласуется с экспериментальными наблюдениями.

Обнаружено направление сдвиговой деформации, а также аморфизации. В ходе сильных ударных волн ($>3.5 \text{ км}/\text{с}$) наблюдалась пластическая деформация в волне сжатия. Получена зависимость сдвиговой прочности от давления.

АВТОКОЛЕБАНИЯ РАЗРЯДА ПОСТОЯННОГО ТОКА С ПЫЛЕВЫМИ ЧАСТИЦАМИ

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

ОИВТ РАН, Москва,

**cryolab@ihed.ras.ru*

При низких значениях тока тлеющего разряда (менее 1 мА) устойчивость пылевой плазмы в значительной мере определяется электрическими параметрами разряда. Коллективные процессы в пылевой плазме могут приводить к развитию неустойчивости, которая в основном связана с потерями энергии плазменных частиц на пылевых частицах. Гибель электронов на пылевых частицах приводит к увеличению напряженности электрического поля и, соответственно, увеличению напряжения на разрядном промежутке [1]. Прирост величины напряженности электрического поля зависит от количества, концентрации, размера и динамического состояния пылевых частиц [2-4]. Возникающая неустойчивость характеризуется периодическими пульсациями свечения разряда. Период пульсаций уменьшается с повышением тока разряда. Автоколебания разряда, в зависимости от условий эксперимента, могут быть с полным прерыванием тока (погасанием разряда) [1, 5] и пульсациями разряда без погасания. Погасание разряда происходит, когда рост напряжения на разряде, связанный с потерями на пылевых частицах, столь значительный, что превышает выходное напряжение источника питания разряда. Автоколебания с полным погасанием разряда наблюдались в разряде в воздухе, а режимы с пульсациями разряда наблюдались в разряде в воздухе и неоне. Пульсации свечения разряда соответствуют различным значениям тока, которым соответствуют различные динамические состояния пылевых частиц и различные положения пылевых частиц в разряде. Переходы между режимами автоколебаний сопровождаются разрушением пылевой структуры и радиальным разлетом пылевых частиц. Если концентрация пылевых частиц уменьшается до значения, когда потери на них много меньше, чем гибель плазменных частиц в свободной плазме, электрические параметры плазмы возвращаются к исходному состоянию, пылевые частицы увлекаются к центру плазменной ловушки, происходит построение, упорядочивание пылевой структуры и повторение процесса.

При уменьшении периода колебаний наблюдалась кумулятивная динамика пылевых частиц. Возвратное движение пылевых частиц сопровождалось уплотнением пылевого облака без стадии формирования и упорядочения пылевой структуры, с последующим радиальным разлетом пылевых частиц. Аналогичные эффекты в пылевой плазме [6], связанные с анизотропным нагревом пылевых частиц и проявлением кумулятивно-реактивных процессов, интересны для исследования методом молекулярной динамики.

Режим с автоколебаниями тока развивается в области падающей вольт-амперной характеристики разряда (отрицательного дифференциального сопротивления), где уменьшение тока может вызывать переход горения разряда к режиму с бегущими стратами и колебаниями в пылевой структуре. Колебания могут привести к уменьшению потерь в плазме [4] и возвращению к исходному режиму горения разряда.

Пылевая плазма в автоколебательном режиме является аналогом мультивибратора с триодной лампой, где роль управляющей сетки играют пылевые частицы, которые, поглощая электроны, фактически запирают ток в данном устройстве. Регулировка глубины обратной связи может производиться количеством пылевых частиц, током разряда, размером, массой и материалом частиц.

1. Vasilyak L.M., Vetchinin S.P., Polyakov D.N., Fortov V.E. // J. Exp. Theor. Phys. 2002. 94(3). 521.
2. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Surf. Eng. Appl. Elect. 2013. 49(2). 114.
3. Vasilyak L.M., Polyakov D.N., Shumova V.V. // Contrib. Plasma Phys. 2013. 53(4-5). 432.
4. Polyakov D.N., Vasilyak L.M., Shumova V.V., Fortov V.E. // SCCS 2011. Book of abstr. P.132.
5. Polyakov D.N., Shumova V. V., Vasilyak L.M. // IEEE T. Plasma Sci. 2014. 42(10). 2684.
6. Vasilyak L.M., Vysikailo F.I., Mitin S.V., Tivkov A.S. // Surf. Eng. Appl. Elect. 2008. 44(5). 377.

ОБРАЗОВАНИЕ УДАРНЫХ ВОЛН И ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР ПРИ ВЗРЫВНОМ ВСКИПАНИИ ПЕРЕГРЕТОЙ ЖИДКОСТИ

Прибатурин Н.А. , Лежнин С.И., Алексеев М.В., Возжаков И.С., Меледин В.Г., Главный В.Г., Куликов Д.В.*

ИТ СО РАН, Новосибирск-90,

**pribaturin@itp.nsc.ru*

Вскипание перегретой жидкости при ее истечении из трубопровода является теплофизическим процессом в котором комплексно сочетаются процессы взрывного парообразования, волновых явлений, развития неустойчивости на межфазной границе, записания потока жидкости.

В данной работе представлены результаты моделирования формирования взрывного истечения перегретой воды в атмосферу при мгновенном торцевом разрыве трубопровода. Рассматривается задача внезапного разрыва трубопровода диаметром от 20 до 150 мм в котором находится вода с давлением до 22 МПа и температурой до 310 0С. Экспериментальное моделирование такого процесса позволяет получить данные о формировании истечения, структуре вскипающей струи жидкости, изменении давления в окружающем пространстве и трубе. Выполнен анализ данных скоростной фоторегистрации процесса истечения, временных изменений давления и паросодержания при формировании истечения.

На основе экспериментальных данных разработаны физическая и расчётная модель истечения, выполнено численное моделирование начальной стадии истечения, характеризующейся генерацией ударной волны и формированием вихревых структур на межфазной границе струя – окружающая атмосфера. Рассчитана эволюция ударной волны, ее амплитуда в зависимости от начальных температуры и давления воды и различных временах раскрытия поперечного сечения разрыва. Показано, что вследствие влияния процесса взрывного вскипания амплитуда образующейся ударной волны в значительной степени зависит от начальной температуры жидкости и повышается при повышении этой температуры. Увеличение времени раскрытия поперечного сечения трубопровода приводит к снижению интенсивности ударной волны. За ударной волной в пространстве, окружающем трубопровод, формируется струя истекающего из разрыва трубопровода вскипающего теплоносителя. В окрестности разрыва вследствие резкого падения давления жидкость перегревается и становится метастабильной. Этот неравновесный эффект учитывается в расчетах. Проведено сопоставление особенностей эволюции ударных волн и формирования

вихревых структур при нестационарном истечении вскипающей жидкости с соответствующими структурами при нестационарном истечении газа. Обнаружено как подобие (аналогия), так и отличительные особенности формирования ударных волн и вихревых структур, имеющих место при истечениях вскипающей жидкости и классического инертного газа из сосуда высокого давления.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект №14-29-00093).

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЖИДКОСТЕЙ

*Рудяк В.Я.*¹, Краснолуцкий С.Л.¹, Минаков А.В.², Гузей Д.В.², Пряжников М.И.²*

¹НГАСУ, Новосибирск, ²НГАСУ СФУ, Красноярск,

*valery.rudyak@mail.ru

Многочисленные уже существующие и возможные применения наножидкостей и их не стандартная физика активно поддерживают не ослабевающий исследовательский интерес к ним. Практически все применения наножидкостей требуют внятного понимания теплофизических свойств наножидкостей и возможности управлять ими. Цель данного доклада и состоит в том, чтобы дать анализ последних экспериментальных и молекулярно-динамических (МД) данных, полученных авторами по измерению и моделированию теплофизических свойств наножидкостей. Исследованы и проанализированы свойства около пятидесяти различных наножидкостей. В частности, обсуждаются: (i) МД данные моделирования уравнения состояния наножидкостей; (ii) МД данные термодиффузии наночастиц; (iii) МД и экспериментальные данные по вязкости и теплопроводности наножидкостей; (iv) экспериментальные данные изучения коэффициента теплообмена наножидкостей при ее течении в цилиндрическом канале (в ламинарном и турбулентном режимах); (v) экспериментальные данные изучения критического теплового потока при кипении наножидкости на цилиндрическом нагревателе.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (грант № 14-19-00312).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ РАЗРУШЕНИЯ ХЛОРИДА НАТРИЯ КОРОТКИМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

Савинцев А.П., Гавашели Ю.О.*

КБГУ, Нальчик,

*pnr@kbsu.ru

Как показали проведенные эксперименты, у прозрачных твердых диэлектриков имеет место определенная зависимость критической напряженности поля порога пробоя (лучевого разрушения) от длительности ультракоротких лазерных импульсов [1].

Глубина лазерного воздействия и, следовательно, объем удаляемого вещества во многом зависят от тепловых и оптических свойств материала, а также энергии лазерного импульса [2].

В проведенной работе экспериментально определялись пороги лучевого разрушения хлорида натрия для фемтосекундных лазерных импульсов. Опыты проводились на уникальной установке ОИВТ РАН «Лазерный фемтосекундный комплекс» [3].

Механизм повреждения приповерхностного объема твердых тел для фемтосекундных лазерных импульсов является абляция. Формирование разного рода частиц (твердых фрагментов, кластеров, капель) является одной из характерных особенностей абляции при использовании мощных импульсов лазерного излучения [4].

В экспериментах было изучено воздействие лазерных импульсов длительностью порядка 40 фс на кристаллы хлорида натрия; интенсивность лазерного излучения на длине волны 800 нм близки поверхности изученных образцов превышала 50 ТВт/см². Для оценки абляционных давлений использовалась формула, приведенная в работе [5].

Поскольку абляция характеризуется определенными закономерностями, можно использовать полученные значения порогов абляции и абляционных давлений для анализа зависимости порога разрушения хлорида натрия от длительности импульса в диапазоне ультракоротких импульсов [6], а также связать макроскопические подходы с молекулярными процессами. В частности, полученные данные, по примеру [3], позволяют рассмотреть молекулярно-динамическое моделирование расширения и остывания поверхностного слоя образца в процессе фемтосекундной абляции материала.

Работа поддержана в рамках базовой части госзадания Минобрнауки России КБГУ на 2014-2016 годы (проект 2014/54-2228).

1. Сверхкороткие световые импульсы / Под. ред. С.М. Шапиро. М. Мир, 1981. 480 с.
2. Савинцев А.П. // Письма в ЖТФ. Т. 34. Вып. 3, 2008. С. 66.
3. Ашитков С.И., Комаров С.П., Овчинников А.В., Струлева Е.В., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Агранат М.Б. // Квантовая электроника. 2014. Т.44. № 6. С. 535.
4. Вейко В.П., Либенсон М.Н., Червяков Г.Г., Яковлев Е.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. Силовая оптика / Под. ред. В.И. Конова. М. ФИЗМАТЛИТ, 2008. 312 с.
5. Карпенко С.В., Савинцев А.П., Темроков А.И. // ДАН. 2008. Т. 419. № 2. С. 179.
6. Савинцев А.П., Гавашели Ю.О. // Тез. докл. 11 Всерос. симп. Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонервновесных средах. М.: ОИВТ РАН. 2013. С. 16.

РАСШИРЕННОЕ УРАВНЕНИЕ МАТЬЕ В ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЕ

*Семёнов В.П.*¹, Тимофеев А.В.²*

¹МИЭМ НИУ ВШЭ, ²ОИВТ РАН, Москва

*VPSemenov@gmail.com

Явление переноса энергии между степенями свободы в плазменно-пылевой системе представляет собой боль-

шой интерес в области исследования пылевой плазмы. Так как флуктуации пылевых частиц в плазме газового разряда в вертикальном и горизонтальном направлениях в большой степени независимы, движение частиц вдоль этих направлений может быть разделено. Таким образом, движение пылевых частиц и некоторые механизмы переноса энергии могут быть описаны расширенным уравнением Маттье: $\ddot{x} + 2\lambda\dot{x} + \omega_0^2(1 + h \cos \omega_p t) = \eta(t)$, где λ — коэффициент трения, h — амплитуда модуляции, ω_0 — собственная частота системы, ω_p — частота параметра, а $\eta(t)$ — случайная сила с нулевым средним.

Для классического уравнения Маттье было предложено приближенное аналитическое решение при $h \ll 1$, $\varepsilon = \omega_p - 2\omega_0/n \ll \omega_0$ и слабом трении [2]. Однако решения расширенного уравнения Маттье авторами в литературе обнаружено не было.

Действуя по аналогии с [2] и применяя усреднение по ансамблю распределений $\eta(t)$ можно получить выражение для показателя роста амплитуды s . Однако результаты, получаемые таким образом, близки к результатам численного моделирования только при отсутствии трения и $h < 1$, в то время как в плазменно-пылевой системе может наблюдаться значительное трение, а значения h могут быть заметно больше 1.

Такое расхождение объясняется тем, что в подходе, предложенном в [2], учитываются только слагаемые нулевого порядка малости при λ . Авторами предложено решение, учитывающее и слагаемые других порядков малости. Результаты, получаемые таким путем, лучше согласуются с результатами, полученными численно. Так же такой подход объясняет сдвиг точки, в которой резонанс наблюдается при минимальном значении h , обусловленный наличием трения в системе.

Уравнение Маттье исследовано на широком диапазоне параметров. Аналитически и численно получены границы областей резонанса, времена наступления резонанса и показатели роста амплитуды при различных значениях параметров системы. Проведено сравнение результатов аналитического решения и численного моделирования.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01295).

1. Vaulina O.S., Petrov O.F., Fortov V.E., Khrapak S.A. and Khrapak A.G. // *Dusty Plasmas: Experiment and Theory* // М.: FIZMATLIT, 2009.
2. Norman G.E. and Timofeev A.V. // *Phys. Rev.* 2011 E 84 056401
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учебное пособие — в 10-ти т. Т. I Механика. — 4-е изд. // М.: Наука, 1988.

ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ТЕРМИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ РЕАКЦИОННОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Сергеев О.В. , Янилкин А.В.*

ФГУП "ВНИИА им. Н.Л.Духова Москва,

**seoman@yandex.ru*

Важной задачей физики энергетических материалов является определение кинетики их термического разложения. Особый интерес представляют реакции в конденсированной фазе при кристаллической и более высокой плотности. В таких условиях термическое разложение происходит за субнаносекундные времена, что к настоящему моменту делает прямое экспериментальное измерение концентраций различных веществ, а следовательно, и кинетики превращения, невозможным. С другой стороны, такие короткие времена процесса делают задачу удобной для изучения атомистическими расчетными методами.

В данной работе рассматривается термическое разложение отдельных молекул и монокристаллов тэна, гексогена и октогена. Для описания межатомного взаимодействия используется потенциал ReaxFF. На основе молекулярно-динамических расчетов определяется изменение концентраций различных химических соединений в расчетной ячейке. Предлагается модель химической кинетики, которая описывает образование продуктов реакции при различных начальных температурах с учетом изменения температуры в ходе расчета. По сравнению с мономолекулярным разложением, в конденсированной фазе наблюдается понижение барьера реакции, что может быть обусловлено появлением дополнительных механизмов образования продуктов.

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СТАНЦИИ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ МОЩНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА БАЗЕ КОЛЛАЙДЕРА ВЭПП-4М.

*Тен К.А.*¹, Титов В.М.¹, Кулипанов Г.Н.², Аульченко В.М.², Толочко Б.П.³, Прууэл Э.Р.¹,
Кашкаров А.О.¹, Шехтман Л.И.², Жуланов В.В.², Косов А.Н.², Евдоков О.В.³,
Шарафутдинов М.Р.³*

¹ИГиЛ СО РАН, ²ИЯФ СО РАН, ³ИХТТМ СО РАН, Новосибирск,

**ten@hydro.nsc.ru*

В Новосибирске введена в эксплуатацию новая станция по исследованию взрывных и ударно-волновых процессов на базе коллайдера ВЭПП-4М. В настоящее время станция состоит из четырех блоков: устройства для генерации синхротронного излучения (СИ), подводящего канала до станции, специализированной взрывной камеры и помещения для регистрирующей аппаратуры. Для генерации СИ используется электронная система коллайдера ВЭПП-4М и семи-полосный вигглер с магнитной индукцией 1,2 Т. Сейчас возможно формирование импульсов СИ длительностью 0,1 – 1 нс и периодом 75 – 1200 нс. Спектр СИ составляет от 20 до 80 кэВ. В промежутке от вигглера до взрывной камеры (длиной 40 м) излучение проходит по вакуумированному каналу в котором установлены затворы, монохроматор, коллиматор и другие устройства. Взрывная камера имеет подвижные бериллиевые окна позволяющие выводить рассеянное излучение под углом 0 – 60 град. по отношению к подведенному пучку. Каждое окно имеет по 6-ть «глушителей» ударной волны, которые позволяют взрывать в камере до 200 грамм ВВ при толщине бериллиевых окон в 2 мм. Взрывная камера также имеет 6-ть степеней свободы для юстировки ее положения относительно луча СИ. В приборном отделении (объемом 40 м³) установлен детектор DIMEX-3, идет монтаж оптической камеры. На новой станции возможно проведение следующих динамических экспериментов: 1. Измерение динамики распределения мало-углового рентгеновского рассеяния (МУРР) в ударно-волновых и детонационных процессах. 2. Измерение распределения плотности на фронте ударной и детонационной волны.

3. Измерение динамики распределения объемной плотности, давления и поля скоростей при разлете продуктов взрыва. 4. Измерение ударных адиабат сплошных сред.

В докладе будут приведены результаты измерений динамики мало-углового рассеяния синхротронного излучения при детонации взрывчатых материалов разного диаметра, а также при взрывном ускорении металлических фольг.

ПЫЛЕВАЯ ПЛАЗМА КАК УНИКАЛЬНЫЙ ОБЪЕКТ ИССЛЕДОВАНИЯ

Тимофеев А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

mail.timofeev.av@gmail.com

Пылевая плазма - ионизированный газ, содержащий макроскопические заряженные частицы. В такой системе наибольший интерес вызывают свойства пылевой компоненты, особенно в условиях, когда пылевые частицы приобретают значительный заряд и их взаимодействия становятся значительными. Пылевая подсистема может характеризоваться различными агрегатными состояниями - газообразным, жидким, кристаллическим, что позволяет исследовать процессы происходящие в системе на кинетическом уровне.

Пылевые частицы в плазме газового разряда подвержены большому числу разнообразных элементарных процессов. Кроме поведения окружающей плазмы можно выделить зарядку частиц, которая приводит к флуктуациям заряда пылевых частиц и зависимости заряда от параметров окружающей плазмы, а соответственно, может зависеть от положения в пространстве относительно электрода. Сильно заряженные пылевые частицы также влияют на свойства окружающей плазмы и параметры разряда, что влияет на заряд соседних пылевых частиц. Уже эти факторы явно указывают на самосогласованность системы и на необходимость учёта коллективных эффектов, что усложняет расчёт свойств плазменно-пылевой системы. В лабораторном эксперименте часто рассматривается пылевая плазма в газовом разряде с низкой степенью ионизации, что приводит к необходимости учёта влияния нейтрального газа. Влияние нейтральных частиц на пылевую частицу можно описать добавляя стохастическую силу. К стохастическому эффекту приводят и флуктуации параметров окружающей плазмы. Немалую роль играют резонансные эффекты, которые приводят к аномально большой кинетической энергии пылевых частиц.

Принципиальная открытость и самосогласованность плазменно-пылевой системы, непостоянство заряда пылевых частиц и зависимость заряда от параметров окружающей плазмы, высокая диссипативность и значительное влияние стохастических процессов, наблюдаемая самоорганизация, а также простота получения и наблюдения за системой в широком диапазоне параметров и условий делают её уникальным объектом исследования и открывают большие возможности для исследования таких сложных самосогласованных систем.

В работе рассматриваются особенности пылевой плазмы и подходов к её изучению. Модель пылевой плазмы строится с учётом флуктуаций заряда и прочих эффектов. Рассматриваются резонансные явления, аномальный разогрев пылевой компоненты, зависимость свойств пылевой плазмы от температуры в широком диапазоне значений, теплофизические свойства плазменно-пылевой системы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01295).

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИФФУЗИИ В УСЛОВИЯХ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПАР - ЖИДКОСТЬ

Харламов Г.В. , Жилкин С.В.*

НГТУ, Новосибирск,

**g_kharlamov@ngs.ru*

Моделирование диффузии в газах и жидкостях методами прямого численного моделирования имеет как теоретический, так и практический интерес. С одной стороны это дает возможность проверить теории и гипотезы, которые используются в физике жидкостей и газов. С другой, позволяет получить новую информацию о механизмах диффузии в условиях фазового перехода пар – жидкость. Такая информация важна для изучения явлений, происходящих в процессе получения наночастиц в пересыщенном паре путем конденсации.

В работе рассчитывались коэффициенты самодиффузии в молекулярной системе Леннарда-Джонсовских частиц методом молекулярной динамики. Сначала вычислялись зависимости автокорреляционных функций скорости частиц от времени. Затем вычислялись коэффициенты самодиффузии по формуле Грина-Кубо. Расчеты проведены в широком диапазоне плотностей и температур системы. Особое внимание уделено расчетам систем в области фазового перехода пар – жидкость. Результаты расчетов сравнивались с экспериментальными данными.

Временная зависимость автокорреляционных функций скорости молекул зависит от плотности и температуры системы. Для систем низкой плотности наблюдаются экспоненциальные зависимости автокорреляционных функций, а коэффициенты самодиффузии соответствуют выводам теории Больцмана-Чепмена-Энскога. Автокорреляционная функция в двухфазных системах состоит из двух участков с сильно различающимися временами релаксации, один из которых – экспоненциальный, связан с диффузией молекул в паре, а другой в жидких каплях.

Обнаружена универсальная зависимость приведенного коэффициента диффузии (по отношению к коэффициенту самодиффузии Больцмана-Чепмена-Энскога) от плотности в однородных системах. Отклонения от этой зависимости наблюдаются в области образования второй фазы – капелек жидкости в паре или пузырьков пара в жидкости, при этом образование капелек в паре приводит к уменьшению, а образование пузырьков в жидкости – к увеличению коэффициента диффузии по сравнению с коэффициентами диффузии в однородной системе при тех же условиях. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными по диффузии в газообразном и жидком аргоне показало хорошее согласие [1].

ОБ ИЗОЭНТРОПИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЯХ В УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ

Хищенко К.В.

ОИВТ РАН, Москва,

konst@ihed.ras.ru

Экспериментальная техника ударных волн широко применяется в исследованиях свойств вещества при высокой концентрации энергии. Данные по ударной сжимаемости материалов являются базовой информацией для проверки и построения широкодиапазонных моделей уравнения состояния. В ударной волне вместе со сжатием происходит скачкообразное увеличение энтропии среды. При нагружении образца серией ударных волн с небольшим перепадом давления на каждом новом шаге энтропия практически перестает увеличиваться, плотность же может возрасти заметно (квазиизоэнтропическое сжатие). При выходе ударной волны на границу с менее жесткой преградой (например, с воздухом) наблюдается изоэнтропическое расширение вещества в волне разгрузки. Регистрация состояний при квазиизоэнтропическом сжатии или изоэнтропическом расширении дает важную информацию о термодинамических свойствах материалов в той области фазовой диаграммы, которая труднодоступна или недоступна для изучения другими методами. В настоящем докладе обсуждаются возможности и достижения экспериментов по измерению параметров изоэнтропических течений в различных материалах (металлы, полимеры). В частности, рассматриваются эффекты, связанные с фазовыми превращениями и возможностью образования метастабильных состояний вещества в таких течениях.

ТРАНСФОРМАЦИЯ ПЛАЗМЕННО-ПЫЛЕВОЙ ЛОВУШКИ В ТЛЕЮЩЕМ РАЗРЯДЕ

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

ОИВТ РАН, Москва,

**Shumova@ihed.ras.ru*

Использование структур из заряженных микрочастиц в плазменных технологиях требует создания методов и реализации условий, необходимых для пространственного удержания и управления пылевыми частицами в технологическом объёме. Поэтому возникает необходимость изучения параметров плазмы, влияющих на параметры удержания пылевых частиц. Пылевая плазма в тлеющих разрядах используется, например, как рабочая среда в плазмохимических реакторах в технологиях нанесения покрытий или образуется при синтезе новой фазы. Форма пылевого облака, образованного в тлеющем разряде, определяется параметрами потенциальной плазменной ловушки, которая образована суперпозицией различных сил и зависит от параметров разряда [1].

В работе экспериментально изучалась зависимость формы пылевых структур, образующихся в тлеющем разряде в неоне от параметров разряда. При увеличении тока разряда наблюдалась трансформация пылевых структур, от однородных по сечению структур к структурам с внутренней полостью, свободной от пылевых частиц. Увеличение тока разряда приводило к увеличению радиального размера пылевых структур. Обнаружено, что значение тока разряда, при котором происходит переход к структурам с полостью, свободной от пылевых частиц, уменьшается при увеличении давления неона.

Выполнено моделирование плазмы разряда постоянного тока с пылевыми частицами на основе диффузионно-дрейфовой модели однородного положительного столба тлеющего разряда в неоне с пылевыми частицами [2] и тепловыделением в разряде. В рамках этой модели в неоне рассмотрено образование, диффузия и рекомбинация электронов, ионов и метастабильных атомов неона. Предполагалось, что вкладываемая в разряд мощность расходуется на нагрев газа [3]. Тепловыделение задавалось профилем концентрации электронов в самосогласованном электрическом поле, обусловленном присутствием пылевых частиц. Профиль температуры газа в разрядной трубке рассчитан путем решения стационарного одномерного уравнения теплопроводности. Приращение температуры газа, вызванное изменением концентрации пылевых частиц и тока разряда, изменяет параметры плазменной ловушки для пылевых частиц. Форма пылевой структуры, локализуемой в ловушке, определяется балансом сил действующих на пылевые частицы в радиальном направлении и описывается профилем потенциальной энергии пылевой частицы.

Показано, что пылевые частицы под действием термофоретической силы выталкиваются в радиальном направлении от наружной границы пылевой структуры к стенке разрядной трубки. Результаты моделирования показывают, что давление неона и ток разряда определяют абсолютное значение минимума потенциальной энергии пылевых частиц. Радиальное положение минимума определяется величиной тока разряда. При увеличении тока разряда минимум потенциальной энергии смещается от оси разряда в радиальном направлении. Результаты расчёта качественно согласуются с данными, полученными в эксперименте.

В предложенной модели не учтены силы взаимодействия между пылевыми частицами, определяющие степень упорядоченности системы. В этой связи представляет интерес моделирование формы пылевой структуры с учётом кулоновского потенциала межчастичного взаимодействия методами молекулярной динамики и сравнения результатов с полученными экспериментальными данными.

Работа поддержана грантом Российского Научного Фонда №14-50-00124.

1. Vasilyak L.M., Vetchinin S.P., Polyakov D.N., Fortov V.E. // J. Exp. Theor. Phys. 2005. 100(5). 1029.
2. Shumova V.V., Polyakov D.N., Vasilyak L.M. // Plasma Sources Sci. T. 2014. 23. 065008.
3. Polyakov D.N., Shumova V.V., Vasilyak L.M. // Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures. 2014. 9(3). 1249.

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

ВНИИА — Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики, Москва,
4 ЦНИИ МО РФ — 4-ый Центральный научно-исследовательский институт Министерства обороны РФ, Юбилейный,
ИТ СО РАН — Институт теплофизики Сибирского отделения РАН, Новосибирск-90,
ИПМАШ РАН — Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург,
ИВТ РАН — Институт высоких температур РАН, Москва,
ИМЕТ РАН — Институт металлургии и материаловедения РАН, Москва,
ИФХЭ РАН — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, Москва,
НГАСУ — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск,
НГАСУ СФУ — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет Сибирский федеральный университет, Красноярск,
СОГУ — Северо-Осетинский государственный университет, Владикавказ,
ИСЭ СО РАН — Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск,
ЗАО "Протон-Электротекс" — Закрытое акционерное общество "Протон-Электротекс Орел",
ИМЕТ УрО РАН — Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург,
МагГТУ — Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова, Магнитогорск,
ФГУП "ВНИИА им. Н.Л. Духова" — ФГУП "ВНИИА им. Н.Л. Духова Москва,
СПбГТИ(ТУ) — Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург,
ИГиЛ СО РАН — Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН, Новосибирск,
ИМПБ РАН — Институт математических проблем биологии РАН, Пушкино Московской обл.,
GSI — Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH, Darmstadt,
КБГУ — Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик,
ФИАН — Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва,
ИОФ РАН — Институт общей физики РАН, Москва,
ИХТТМ СО РАН — Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения РАН, Новосибирск,
НГТУ — Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск,
ФГУП ВИАМ — Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, Москва,
ИНЭП ЮФУ — Институт нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета, Таганрог,
МИЭМ НИУ ВШЭ — Московский институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», Москва,
ИХФ РАН — Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва,
ИЯФ СО РАН — Институт ядерной физики им. Будкера Сибирского отделения РАН, Новосибирск,
ЮУрГУ — Южно-уральский государственный университет, Челябинск,
МГУ — Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва,
МИСиС — Московский институт стали и сплавов, Москва,
МИФИ — Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет), Москва,
СПбГПУ — Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург,
МФТИ — Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный,
ОИВТ РАН — Объединенный институт высоких температур РАН, Москва,
University of Maryland, U.S.A. — Department of Chemical and Biomolecular Engineering and Institute for Physical Science and Technology, University of Maryland, College Park, U.S.A.

ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. *Алероев Муслим Ахметханович*, КБГУ, Нальчик, тел.: +7(928)7063286, факс: +7(8662)422560, muslim-1982@mail.ru
2. *Anisimov Mikhail Alexeevich*, УМСР, USA, тел.: +7(499)1386054, факс: +1(301)3149408, anisimov@umd.edu
3. *Ассовский Игорь Георгиевич*, ИХФ РАН, Москва, тел.: +7(495)9397267, факс: +7(495)6512191, assov@chph.ras.ru
4. *Балакирев Сергей Вячеславович*, ИНЭП ЮФУ, Таганрог, тел.: +7(960)4642791, факс: +7(863)4361500, s.v.balak@gmail.com
5. *Бедрань Захар Вадимович*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(926)1232597, факс: +7(495)4857990, zbedran@yandex.ru
6. *Быстрый Роман Григорьевич*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(985)6474714, факс: +7(985)6474714, broman.meld@gmail.com
7. *Воронцов Александр Геннадьевич*, ЮУрГУ, Челябинск, тел.: +7(351)2654713, факс: +7(351)2679900, sas@physics.susu.ac.ru
8. *Гавашели Юлия Олеговна*, КБГУ, Нальчик, тел.: +7(962)6504570, факс: +7(962)6504570, yu-pakhunova@mail.ru
9. *Галиуллина Гульназ Маратовна*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(985)1647116, факс: +7(495)4858545, gulnaz_g@inbox.ru
10. *Гельчинский Борис Рафаилович*, ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, тел.: +7(922)2162633, факс: +7(343)2678914, brg47@list.ru
11. *Груздков Алексей Андреевич*, СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, тел.: +7(812)4949232, факс: +7(812)3163027, gruzdkov@mail.ru
12. *Кирова Елена Михайловна*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(926)8722257, факс: +7(926)8722257, kirova@phystech.edu
13. *Кисленко Сергей Александрович*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4842347, факс: +7(495)4842347, kislenko-s@mail.ru
14. *Кондратюк Николай Дмитриевич*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(919)7711778, факс: +7(495)4857990, kondratyuk@phystech.edu
15. *Коротаев Павел Юрьевич*, ВНИИА, Москва, тел.: +7(499)9787803, факс: +7(499)9780903, korotaev@vniia.ru
16. *Костюченко Татьяна Сергеевна*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(915)0191088, факс: +7(495)4857990, tatiana.s.kostyuchenko@gmail.com
17. *Красюк Игорь Корнелиевич*, ИОФ РАН, Москва, тел.: +7(916)6228254, факс: +7(499)1352055, krasyuk99@rambler.ru
18. *Кривошеев Сергей Иванович*, СПбГПУ, Санкт-Петербург, тел.: +7(911)2470703, факс: +7(812)5358051, ksi.mgd@gmail.com
19. *Куриленков Юрий Константинович*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4841647, факс: +7(495)4857990, kurilenkovyuri@gmail.com
20. *Лагов Петр Борисович*, МИСиС, Москва, тел.: +7(495)6384457, факс: +7(499)2365654, lagov2000@mail.ru
21. *Ланкин Александр Валерьевич*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(903)5768208, факс: +7(495)4857990, Alex198508@yandex.ru
22. *Ленёв Дмитрий Юрьевич*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(985)1753037, факс: +7(985)1753037, lenevdy@mail.ru
23. *Лопаницына Наталия Юрьевна*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(925)8515835, факс: +7(495)4858545, lopanitsyna@phystech.edu
24. *Мазо Михаил Абрамович*, ИХФ РАН, Москва, тел.: +7(495)9397139, факс: +7(499)1358082, Mikhail.mazo1@gmail.com
25. *Маневич Леонид Исакович*, ИХФ РАН, Москва, тел.: +7(495)9397139, факс: +7(499)1358284, manevitchleonid3@gmail.com
26. *Николаев Владислав Сергеевич*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(916)0917754, факс: +7(495)4859263, vladiorussia@mail.ru
27. *Норман Генри Эдгарович*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(925)0420997, факс: +7(495)4857990, genri.norman@gmail.com
28. *Орехов Максим Александрович*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(925)0016628, факс: +7(925)0016628, mo2411@mail.ru
29. *Орехов Никита Дмитриевич*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(985)1886637, факс: +7(495)4857990, nikita.orekhov@gmail.com
30. *Орешкин Владимир Иванович*, ИСЭ СО РАН, Томск, тел.: +7(3822)492988, факс: +7(382)2491677, oreshkin@ovpe.hcei.tsc.ru
31. *Орешкин Евгений Владимирович*, ФИАН, Москва, тел.: +7(965)4035593, факс: +7(499)1326470, bombom774@gmail.com
32. *Павлов Юрий Сергеевич*, ИФХЭ РАН, Москва, тел.: +7(916)6401761, факс: +7(495)3350078, rad05@bk.ru
33. *Писарев Василий Вячеславович*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, pisarevvv@gmail.com
34. *Покаташкин Павел Александрович*, ВНИИА, Москва, тел.: +7(963)9281991, факс: +7(499)9780903, p.a.pokataшкиn@gmail.com
35. *Поляков Дмитрий Николаевич*, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4841810, факс: +7(495)4857990, cryolab@ihed.ras.ru
36. *Прибатурин Николай Алексеевич*, ИТ СО РАН, Новосибирск-90, тел.: +7(383)3165547, факс: +7(383)3308480, pribaturin@itp.nsc.ru
37. *Рудяк Валерий Яковлевич*, НГАСУ, Новосибирск, тел.: +7(383)2668758, факс: +7(383)2664083, valery.rudyak@mail.ru
38. *Савинцев Алексей Петрович*, КБГУ, Нальчик, тел.: +7(8662)423777, факс: +7(8662)422560, png@kbsu.ru

39. Семёнов Владимир Павлович, МИЭМ НИУ ВШЭ, Москва, тел.: +7(965)2990484, факс: +7(965)2990484, VPSeменов@gmail.com
40. Сергеев Олег Вячеславович, ФГУП "ВНИИА им. Н.Л.Духова Москва, тел.: +7(919)9669730, факс: +7(499)9780903, seoman@yandex.ru
41. Смирнов Александр Ильич, ИПФ РАН, Нижний Новгород, тел.: +7(831)4160656, факс: +7(831)4160616, smirnov.appl@gmail.com
42. Стегайлов Владимир Владимирович, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, stegailov@gmail.com
43. Тен Константин Алексеевич, ИГиЛ СО РАН, Новосибирск, тел.: +7(913)9031515, факс: +7(383)3331612, ten@hydro.nsc.ru
44. Тимофеев Алексей Владимирович, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4859263, факс: +7(495)4857990, timofeevalvl@gmail.com
45. Харламов Георгий Владимирович, НГТУ, Новосибирск, тел.: +7(383)2002278, факс: +7(383)3460209, g_kharlamov@ngs.ru
46. Хищенко Константин Владимирович, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4842483, факс: +7(495)4857990, konst@ihed.ras.ru
47. Шумова Валерия Валерьевна, ОИВТ РАН, Москва, тел.: +7(495)4842610, факс: +7(495)4857990, shumova@ihed.ras.ru