

# НОВЫЙ АФОН 2006

22 июля – 1 августа



4-й Российский симпозиум

## Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах

Тезисы докладов

НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО КОМПЛЕКСНОЙ ПРОБЛЕМЕ  
«ФИЗИКА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ»  
ИНСТИТУТ ТЕПЛОФИЗИКИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ  
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ  
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ  
4-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

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

В сборнике представлены тезисы докладов 4-го Российского симпозиума «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Новый Афон, 22 июля - 1 августа 2006 г.) Доклады отражают современное состояние исследований в следующих областях: ударная прочность твёрдых тел, накопление дефектов при импульсных нагрузках, метастабильные состояния вещества и их распад, отрицательные давления, релаксационные процессы и химические реакции во фронте ударных и детонационных волн, взаимодействие мощных ионных, электронных и лазерных пучков с веществом, лазерная физика ультракоротких, в том числе фемтосекундных импульсов, неравновесная и неидеальная плазма. Рассмотрены экспериментальные исследования, теория и атомистическое моделирование релаксации и динамических процессов.

Тематика Симпозиума, формирующаяся за годы его проведения, все большее внимание уделяет рассмотрению динамики всех процессов в веществе, начиная с электронного, атомистического или молекулярного уровня и дальнейшему переходу к мезо- и макроскопическому описанию. На переднем крае находятся исследования конденсированного состояния. Особое внимание уделяется установлению связей между атомно-электронным, молекулярным, мезо- и макроскопическим уровнями описания — так называемому multi-scale подходу, подразумевающему объединение масштабов описания различных теоретических моделей (bridging the scales), в частности, определению связи между квантовым и классическим уровнями описания. Параллельные экспериментальные исследования позволяют верифицировать как модели на каждом уровне описания, так и надежность предлагаемых связей между уровнями.

Под редакцией  
Нормана Г. Э., Стегайлова В. В., Кима В. В.,  
Ефремова В. П., Савинцева А. П.

**ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

Фортов В.Е., сопредседатель, Президиум РАН, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва  
Карамурзов Б.С., сопредседатель, КБГУ, Нальчик  
Ефремов В.П., зам. председателя, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва  
Минцев В.Б., зам. председателя, ИПХФ РАН, Черноголовка  
Норман Г.Э., зам. председателя, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва  
Савинцев А.П., зам. председателя, КБГУ, Нальчик  
Кочеткова Н.С., помощник председателя, ИПХФ РАН, Черноголовка  
Ким В.В., учёный секретарь, ИПХФ РАН, Черноголовка  
Стегайлов В.В., учёный секретарь, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

Симпозиум проведен при поддержке РФФИ (грант №06-02-26054).

Веб-сайт конференции  
<http://www.ihed.ras.ru/afon06>

Отпечатано в ИПХФ РАН, г. Черноголовка Московской области

## ОГЛАВЛЕНИЕ

### СЕКЦИЯ 1. УДАРНАЯ ПРОЧНОСТЬ ТВЁРДЫХ ТЕЛ, КРИСТАЛЛЫ ПРИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ДАВЛЕНИЯХ

<i>Канель Г.И., Разоренов С.В.</i> Высокоскоростное разрушение: задачи, результаты измерений, модели . . .	5
<i>Морозов И.В., Норман Г.Э., Скобелев И.Ю.</i> Начальная стадия дефектообразования в твердых телах под действием быстрых одиночных тяжелых ионов . . . . .	5
<i>Gokhman A., Bergner F., Ulbricht A.</i> The problem to account for processes on different time scales in the investigation of neutron embrittlement . . . . .	6
<i>Янилкин А.В.</i> Разрушение и структурные превращения металлов при ударно-волновом нагружении. исследование методом молекулярной динамики . . . . .	7
<i>Якушев В.В., Уткин А.В., Жуков А.Н.</i> Инициированный ударной волной фазовый переход в нитриде кремния . . . . .	7
<i>Альмов М.И.</i> Свойства и методы получения объемных нанокристаллических материалов . . . . .	8
<i>Мамчуев М.О., Карпенко С.В.</i> Термодинамический расчет давления металлизации ионных диэлектриков	8
<i>Гольшев А.А., Молодец А.М.</i> Модельные расчеты зависимости коэффициента теплопроводности периклаза (MgO) от давления . . . . .	9

### СЕКЦИЯ 2. МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ИХ РАСПАД

<i>Кучеренко М.Г.</i> Кинетика лазероиндуцированных процессов в молекулярных наноструктурах . . . . .	10
<i>Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В.</i> Атомистическое моделирование поверхностного плавления	10
<i>Башарин А.Ю., Турчанинов М.А.</i> Псевдобинарная структура жидкого углерода низкой плотности . . . . .	11
<i>Гельчинский Б.Р., Мирзоев А.А., Дюльдина Э.В.</i> Моделирование высокотемпературных металлических расплавов методом первопринципной молекулярной динамики: жидкий цезий . . . . .	11
<i>Зубов В.И.</i> О влиянии тепловых вакансий на термодинамические свойства и устойчивость Ван-дер-Ваальсовых кристаллов . . . . .	11
<i>Сосиков В.А., Уткин А.В.</i> Особенности кавитации жидкости вблизи температуры замерзания . . . . .	12
<i>Беспалов Е.В., Вяткин В.С., Дорофеев Г.Л., Ефремов В.П., Красноперов Е.П., Куроедов Ю.Д., Фортвов В.Е.</i> Распространение неустойчивостей в проволочных сверхпроводниках NbTi и NbZr . . . . .	12
<i>Черевко А.Г.</i> Влияние коэффициента аккомодации на температурные флуктуации критических кластеров	13
<i>Карпенко С.В., Савинцев А.П.</i> О возможном механизме В1-В2 фазового перехода в ионных кристаллах .	14
<i>Карпенко С.В., Савинцев А.П.</i> Исследование зонной структуры кристаллов оксидов щелочно-земельных элементов, находящихся в условиях земных недр . . . . .	14

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

<i>Губин С.А., Викторов С.Б., Богданова Ю.А.</i> Расчеты ударных адиабат многокомпонентной газовой (флюидной) фазы на основе потенциалов взаимодействия молекул . . . . .	16
<i>Смирнов А.Л., Каркач С.П., Скребков О.В., Дремлин А.Н.</i> Молекулярная динамика процесса детонации жидких ВВ на основе модельных поверхностей потенциальной энергии многоатомных молекул . . . . .	16
<i>Болеста А.В., Томпсон Д.Л.</i> Молекулярно-динамическое моделирование распространения ударной волны в метане . . . . .	17
<i>Уткин А.В., Мочалова В.М.</i> Влияние дисперсности и начальной плотности на структуру детонационной волны в прессованном TNETV . . . . .	17
<i>Зубков П.И., Карташов А.М.</i> Колебания поляризации в детонационных волнах в порошковых взрывчатых веществах . . . . .	17
<i>Milyavskiy V.V., Utkin A.V., Khishchenko K.V., Yakushev V.V., Zhuk A.Z., Fortov V.E.</i> Shock compression and equation of state of C <sub>60</sub> fullerite . . . . .	18
<i>Хищенко К.В.</i> Уравнение состояния и фазовые превращения церия при высоких давлениях и температурах	18
<i>Скребков О.В., Каркач С.П., Иванова А.Н., Костенко С.С., Смирнов А.Л.</i> Колебательная неравновесность и электронное возбуждение при инициировании и развитии реакции водорода с кислородом за ударной волной . . . . .	18
<i>Торунов С.И., Уткин А.В., Ефремов В.П., Фортвов В.Е.</i> Экспериментальное исследование ударной сжимаемости CuO+V и Zn+S. . . . .	19
<i>Соколов С.Н., Миллявский В.В., Бородин Т.И., Жерноклетов Д.М., Жук А.З.</i> Ударно-волновое нагружение фуллерена C <sub>70</sub> с гпу-структурой в области давлений до 19 ГПа . . . . .	19

### СЕКЦИЯ 4. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЩНЫХ ИОННЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ С ВЕЩЕСТВОМ

<i>Ефремов В.П.</i> Взаимодействие мощных потоков энергии с пористыми и конденсированными мишенями .	20
<i>Пичку мл. С.А., Розмей О.Н., Ефремов В.П., Фертман А.Д., Коростий С., Блажевич А., Фортвов В.Е., Хоффманн Д.Х.Х.</i> Рентгеновские спектры излучения конденсированных сред под воздействием одиночных тяжелых ионов . . . . .	20
<i>Шутов А.В., Григорьев Д.А.</i> Численное моделирование экспериментов по взаимодействию пучков тяжелых ионов с фольгами-мишенями . . . . .	21
<i>Фролов А.А.</i> Возбуждение поверхностных волн коротким лазерным импульсом на границе плазмы . . . . .	21
<i>Кузнецов С.В., Андреев Н.Е.</i> Ускорение немонотонных энергетических электронных ступок в нелинейной кильватерной волне . . . . .	22

**СЕКЦИЯ 5. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ**

Иногамов Н.А., Агранат М.Б., Анисимов С.И., Ашитков С.И., Жазовский В.В., Ломоносов И.В., Ниши- хара К., Овчинников А.В., Петров Ю.В., Фортков В.Е., Хищенко К.В., Хохлов В.А. Фемтосекундная абляция золота: численное моделирование и эксперимент . . . . . 23

Ашитков С.И., Овчинников А.В., Ситников Д.С., Агранат М.Б. О процессах поглощения излучения, ге- нерации электронно-дырочной плазмы и плавления в полупроводниках под действием фемтосекунд- ных лазерных импульсов . . . . . 23

Ситников Д.С., Агранат М.Б., Ашитков С.И., Овчинников А.В. Интерферометрическая методика иссле- дования процессов взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом . . . . . 24

**СЕКЦИЯ 6. НЕРАВНОВЕСНАЯ ПЛАЗМА, ВОЛНЫ ИОНИЗАЦИИ, ПРОВОДЫ В ГАЗАХ**

Аксьонов В.С., Губин С.А., Голуб В.В., Ефремов К.В. Условия существования скользящего разряда и оценка создаваемых им усилий в дозвуковом и сверхзвуковом потоке воздуха . . . . . 25

Александров Н.Л., Базелян Э.М., Богатов Н.А., Степанов А.В. Исследование механизма инициации раз- ряда в постоянном электрическом поле с помощью плазменного канала, создаваемого мощным фем- тосекундным лазерным импульсом . . . . . 25

Ланкин А.В. Ограничение статистической суммы связанных пар в неидеальной плазме . . . . . 26

Обручкова Л.Р., Апфельбаум Е.М., Левашов П.Р., Хищенко К.В. Об использовании ячеечной модели Томаса-Ферми для разработки двухтемпературного уравнения состояния плазмы . . . . . 26

**ИНДЕКС ПО АВТОРАМ** . . . . . 27

**ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ** . . . . . 28

**ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ** . . . . . 28

**ВЫСОКОСКОРОСТНОЕ РАЗРУШЕНИЕ: ЗАДАЧИ, РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ, МОДЕЛИ**

*Канель Г.И.<sup>\*1</sup>, Разоренов С.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, <sup>2</sup> ИПХФ РАН, Черноголовка

*\*kanel@fscp.ac.ru*

В экспериментах с импульсами ударно-волновой нагрузки наносекундных длительностей удается создавать чрезвычайно большие растяжения твердых тел и жидкостей, при которых величины отрицательных давлений (растягивающих напряжений) могут достигать значений, сравнимых с предельно возможной теоретической прочностью конденсированного вещества. Вследствие недостатка времени для обмена информацией между отдельными микрообъемами тела, разрушение в этих условиях имеет рассеянный характер и происходит путем одновременного зарождения, роста и слияния многочисленных трещин или пор. Можно надеяться, что изучение основных закономерностей этих процессов и их вкладов в общую кинетику разрушения даст возможность получения сведений об элементарных актах разрушения и наиболее фундаментальных прочностных свойствах материалов. Основной задачей исследований в этой области в настоящее время является создание теоретических основ испытаний материалов субмикросекундными импульсами нагрузки и разработка способа их описания, информативного с материаловедческой точки зрения. В докладе анализируются методы и результаты экспериментальных исследований субмикросекундных разрушений, основные закономерности явления, существующие интегральные критерии и континуально-кинетические модели явления, а также формулируются актуальные, на взгляд автора, вопросы для теоретического анализа и атомистического моделирования процессов зарождения, роста и взаимодействия несплошностей.

Сопrotивление разрушению материалов в субмикросекундном диапазоне длительностей нагрузки определяют из исследований откольных явлений при отражении импульса сжатия от поверхности тела. При этом, вследствие одномерности ударно-волновой нагрузки, а также в силу того, что величина разрушающих напряжений, как правило, многократно превышает предел текучести материала, процесс разрушения происходит при напряженном состоянии, близком к всестороннему растяжению. Откольная прочность материалов исследуется уже десятки лет, однако до сих пор в литературе появляются противоречивые данные, требующие критической оценки их достоверности. Дело в том, что волновая динамика откола в твердом теле осложнена упругопластическими свойствами. Наличие нескольких скоростей звука приводит к искажению получаемой информации и требует внимательного выбора условий проведения измерений. Как правило, измерения не дают свидетельств заметного «периода индукции» разрушения. Сопrotивление разрушению в этом временном диапазоне сильнее зависит от скорости растяжения, чем это имеет место в обычных условиях. Измерения демонстрируют влияние структурных факторов и ориентации нагрузки относительно текстуры материала на реализуемую откольную прочность. Температурные зависимости откольной прочности не коррелируют с поведением динамического предела текучести, что дает основание для предположения об определяющем вкладе процессов зарождения (а не роста) несплошностей. Существующие расчетные модели разрушения пока не дают адекватного описания всех наблюдаемых деталей явления в широком диапазоне длительностей и недостаточно информативны с материаловедческой точки зрения. Представляется полезным формализовать результаты наблюдений путем введения представления о спектре дефектов материала, характеризующихся различными уровнями напряжения, необходимыми для их активирования.

**НАЧАЛЬНАЯ СТАДИЯ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ  
БЫСТРЫХ ОДИНОЧНЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ**

*Морозов И.В.<sup>1</sup>, Норман Г.Э.<sup>\*1</sup>, Скобелев И.Ю.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, <sup>2</sup> ВНИИФТРИ, Менделеево

*\*norman@ihed.ras.ru*

Взаимодействие быстрых одиночных тяжелых ионов с конденсированным веществом сопровождается излучением рентгеновских спектральных линий, обусловленных радиационным распадом автоионизационных состояний многозарядных ионов вещества мишени. Это излучение несет в себе информацию о состоянии вещества в области взаимодействия и, как показано в настоящей работе, может быть использовано для диагностики начальной стадии дефектообразования.

До сих пор интерпретация регистрируемых спектров основывалась на «атомной» модели, предполагающей, что наблюдаемые рентгеновские спектры полностью определяются взаимодействием налетающего иона с атомом среды и оказываются никак не связанными с состоянием среды, возникшем после пролета возбуждающей частицы. В рамках такой модели релаксация первоначально образованного возбужденного состояния среды происходит только за счет процессов автоионизации и радиационного распада, а интенсивности наблюдаемых рентгеновских линий просто пропорциональны сечениям соответствующих процессов многократной ионизации, умноженным на факторы ветвления  $A/(A + \Gamma)$ , где  $A$  — вероятность радиационного перехода, а  $\Gamma$  — вероятность автоионизации.

Таким образом, «атомная» модель полностью игнорирует тот факт, что в возникшем после первоначально-го процесса ионизации плазмоподобном состоянии вещества процессы релаксации возбужденного состояния иона могут быть гораздо более разнообразными. Например, за счет столкновений с образовавшимися свободными электронами, первоначально возникший ион  $Z$  может ионизоваться или рекомбинировать до того, как произойдет заполнение  $K$ -вакансии при радиационном переходе. Это означает, что первоначальное возбуждение иона  $Z$  может в действительности приводить к излучению спектральной линии иона  $Z' \neq Z$ , а наблюдаемый рентгеновский спектр будет отражать не только характеристики взаимодействия налетающего иона с атомами среды, но и параметры (температуру, плотность) образованной плазмы.

Для изучения релаксационных процессов в плазме, образованной в области пролета тяжелого иона, поведение молекулярно-динамическое (МД) моделирование. В расчетах использовалась модель плазмы с концентрацией электронов  $n_e = 2 \times 10^{23} \text{ см}^{-3}$ , температурой  $T_e = 55 \text{ эВ}$  и зарядом ионов  $Z = 2$ . При этих параметрах плазма

является неидеальной: параметр неидеальности  $\Gamma = 0.25$ , число частиц в сфере Дебая  $N_d = 1.6$ .

В первую очередь была определена скорость установления максвелловского распределения для электронов, имеющих в начальный момент времени одинаковую по модулю скорость, т.е. распределение в виде  $\delta$ -функции. С помощью моделирования установлено, что время установления распределения Максвелла составляет доли фемто-секунд, что значительно меньше времени спектральных измерений. Небольшая доля быстрых электронов, обладающей сразу после ионизации тяжелым ионов энергией  $T_e^* \gtrsim 3000$  эВ, релаксируют до тепловых скоростей за время  $t \sim 30$  фс.

Для построения модели излучения электронов необходимо знать структуру ионной решетки в различные моменты времени. С помощью моделирования было установлено, что для описываемого эксперимента ионы продолжают находиться в узлах кристаллической решетки более 2.5 пс после ионизации. Это время значительно превышает время высвечивания рентгеновских спектров, поэтому движением ионов здесь можно пренебречь.

С использованием результатов МД моделирования предпринята попытка построения более общей плазменной модели релаксации среды в области треков тяжелых ионов в конденсированных средах, основанной на решении зависящих от времени уравнений радиационно-столкновительной кинетики. При этом в качестве начального условия использовано состояние среды, описываемое «атомной» моделью. Проведенные расчеты позволили как определить области значений параметров среды, при которых плазменная модель фактически переходит в атомную, так и выяснить условия, для которых атомная модель является слишком грубым приближением. Полученные результаты использованы для интерпретации рентгеновских спектров, зарегистрированных в экспериментах, проведенных ранее на линейном ускорителе тяжелых ионов UNILAC (GSI, Дармштадт, Германия) при использовании твердотельных алюминиевых и аэрогельных кварцевых мишеней. Показано, что 1) плазменная модель релаксации, в отличие от «атомная» позволяет описать наблюдаемые спектры, и 2) электронная температура плазмы в области трека тяжелого иона на начальной стадии его формирования составляет 10 - 50 эВ в зависимости от условий экспериментов.

Полученные результаты могут быть положены в основу дальнейших исследований, направленных на изучение последующих стадий формирования дефектов в веществе после пролета тяжелых ионов.

## THE PROBLEM TO ACCOUNT FOR PROCESSES ON DIFFERENT TIME SCALES IN THE INVESTIGATION OF NEUTRON EMBRITTLEMENT

*Gokhman A.\*<sup>1</sup>, Bergner F.<sup>2</sup>, Ulbricht A.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>SUPU, Odessa, Ukraine, <sup>2</sup>FZR, Dresden, Germany

\*gokhman@paco.net

Neutrons with energy of about 1 MeV or higher, to which reactor pressure vessel steels are exposed under service conditions of nuclear power plants, can stimulate the phenomenon of so-called neutron embrittlement. The reason is the irradiation-induced formation and evolution of precipitates and solute/defect clusters. The set of experimental methods to investigate the nanostructure, including X-ray and neutron small angle scattering, atom probe field ion microscopy method, TEM as well as direct determination of the mechanical properties of the reactor vessel is usually carried out after irradiation intervals of the order of one year.

Therefore a project called virtual test reactor has been started recently within the framework of the European program "PERFECT". Experimental data obtained for neutron irradiated pressure vessel steels are used as the reference for working out and study theoretical models of the kinetics of neutron embrittlement.

In the cascade stage, following the interaction of a neutron with a so-called primary knock-on atom, the recoil energy transferred to the crystal lattice causes a local increase of the temperature to beyond the melting temperature and the formation of defects. A typical time scale for these processes is picoseconds. Such processes are studied by the molecular dynamics and Monte-Carlo methods.

Unlike the case of electron irradiation, where only Frenkel pairs are formed, point defect clusters and Cu-precipitates are produced in the case of neutron irradiation. The evolution of these clusters can be studied in the rate theory approach, in particular by cluster dynamics method. This method allows for the determination of the time dependence of the number density of clusters (precipitates) via integration of the system of ordinary differential equations with the initial data as the final data of the cluster number density after cascade stage. The characteristic relaxation time depends on the kind of the irradiated feature. For example for point defect clusters this time is about 1 day but for Cu-precipitates the relaxation time is about one month. Hence the problem to integrate the master equation of cluster dynamics is the problem of integration of so-called stiff ordinary differential equations.

The objective of our present investigation is the comparative analysis of software tools applied to the cluster dynamics modeling. The most effective one, namely the code D02EJF from the licensed Fortran NAG Library has been used to investigate the kinetics of the following three kinds of neutron irradiated features in reactor pressure vessel steels:

- The system of free and clustering vacancies (V) and interstitials (I), denoted (V+I)-system,
- The system of the Cu-precipitates favoured because of irradiation-enhanced Cu diffusivity, denoted (V+I) $\Rightarrow$ Cu system,
- The (V+I) $\Leftrightarrow$ Cu system, when the effect of Cu-precipitates on the sink strength in the first and second model is additionally considered.

The comparison of the experimental and cluster dynamics data has been carried out on the basis of low-Cu and Cu-enriched mock-up alloys after neutron irradiation.

# РАЗРУШЕНИЕ И СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ МЕТАЛЛОВ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Янилкин А.В.

ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

yanilkin@ihed.ras.ru

В условиях, когда время разрушения сравнимо с временем длительности нагрузки высокоскоростное разрушение имеет релаксационный характер [1]. В этой связи интерес представляют вопросы, связанные с начальным этапом зарождения повреждений. Высокие скорости растяжения в волне разряжения дают возможность исследовать разрушение при ударно-волновом нагружении с помощью структур с идеальной кристаллической решеткой в качестве нулевого приближения. В данной работе рассмотрены два металла: алюминий и железо, имеющие различные решетки при нормальных условиях. В расчетах применялись реалистические многочастичные потенциалы межатомного взаимодействия в рамках модели погруженного атома (т.н. embedded atom method potentials) [2,3]. Рассмотрены процессы, происходящие при ударно-волновом нагружении вдоль кристаллографического направления [100]. Из фазовой диаграммы железа следует, что в волне сжатия при напряжениях выше  $\sigma_{xx}=13$  ГПа должно происходить превращение исходной о.ц.к. в структуру с плотной упаковкой, такое превращение наблюдалось, но происходило при больших давлениях,  $\sigma_{xx}=50$  ГПа. Алюминий исследовался при нагружении до 20 ГПа. В алюминии не наблюдалось фазовых превращений, но в результате потери сдвиговой устойчивости решетки, в ней образовывались плоскости сдвига. При отражении волны сжатия от свободной поверхности мишени возникают растягивающие напряжения, приводящие отколу. В железе перед потерей сплошности наблюдается быстрое структурное превращение при напряжениях  $\sigma_{xx}=-13$  ГПа. При этом давлении происходит переход исходной о.ц.к. решетки в г.ц.к. Похожие результаты получены в *ab initio* расчетах [4]. Дело в том, что г.ц.к. решетка получается в результате непрерывного растяжения исходной о.ц.к. в направлении [100], таким образом, превращение не требует больших структурных изменений и обладает небольшим активационным барьером. Образующаяся структура является неустойчивой по отношению к сдвиговым деформациям, поэтому в ней возникают плоскости сдвига. Плоскости сдвига являются центрами гетерогенной нуклеации, что уменьшает прочность. Для алюминия не происходит каких-либо структурных изменений в области отрицательных давлений, и потеря сплошности происходит по другому механизму. Образующиеся плоскости сдвига в волне сжатия не успевают исчезнуть до возникновения отрицательных напряжений. В этих областях структура теряет однородности и становится похожей на жидкость, в которой позже образуются полости. Таким образом, в данной работе рассмотрены различные структурные превращения и механизмы потери сплошности.

1. Разоренов С.В., Канель Г.И., Фортов В.Е. // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т.80. Вып.5. С. 395-397.
2. Mendeleev M.I. et al., // Phil. Mag. 2003. V.83. No.35. P.3977.
3. Mishin Y., Farkas D., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. № 5. P. 3393-3407.
4. Ju Li // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2003. V.11. P.173-177.

## ИНИЦИИРОВАННЫЙ УДАРНОЙ ВОЛНОЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В НИТРИДЕ КРЕМНИЯ

Якушев В.В., Уткин А.В.\*, Жуков А.Н.

ИПХФ РАН, Черноголовка

\*utkin@icp.ac.ru

В данной работе проведено экспериментальное исследование фазового перехода  $\beta$ -фазы нитрида кремния с гексагональной структурой в с-фазу с кубической структурой в пористых образцах (пористость около 15%) в диапазоне давлений 30-50 ГПа. Образцы были изготовлены путем прессования мелкодисперсного порошка нитрида кремния, полученного методом СВС, в камере высокого давления при давлении 2 ГПа, температуре 1600 С и времени выдержки 10 минут.

Нитрид кремния интенсивно исследуется в связи с его высокими механическими, электрическими и термическими характеристиками и находится на третьем месте по прочности после алмаза и нитрида бора. Известны три кристаллические модификации нитрида кремния:  $\alpha$  и  $\beta$  – с гексагональной структурой и не так давно полученная с-модификация с кубической структурой. В настоящее время предполагается производить высокоплотную с-фазу нитрида кремния из его  $\beta$ -фазы методом детонационного синтеза. В связи с этим необходимо уточнить параметры фазового перехода, определить границы существования с-фазы на фазовой диаграмме, проследить развитие кинетики фазового перехода во времени и на основании этих данных определить условия максимального выхода с-фазы. В данной работе исследуются условия перехода  $\beta$ -фазы в с-фазу в пористых образцах нитрида кремния при динамическом нагружении. Нагружение образцов осуществлялось Al ударниками, разогнанными с помощью взрывных метательных устройств через Al и Cu экраны. Регистрация скорости поверхности образца осуществлялась с помощью лазерного измерителя скорости VISAR.

О фазовом переходе в веществе при ударно-волновом нагружении свидетельствует расщепление ударной волны с образованием двухволновой конфигурации. По скорости распространения второй волны можно судить о сжимаемости образовавшейся фазы, а по размытию ее фронта о кинетике фазового перехода. Это справедливо для образцов с низкой пористостью. Если пористость высока, то двухволновой конфигурации может не наблюдаться. Именно такая ситуация имела место при проведении данных экспериментов. Поэтому в настоящем исследовании фазовый переход в нитриде кремния при однократном нагружении регистрируется по величине перепада массовой скорости в волне разгрузки, амплитуда которого связана со сжимаемостью материала образца.

Из анализа волновых взаимодействий на диаграмме давление-массовая скорость были оценены величины перепадов массовой скорости  $\Delta w$  для случая отсутствия фазового превращения ( $\beta$ -фаза) и случая его полного завершения (с-фаза). Согласно проведенным исследованиям при давлении нагружения 30 ГПа перепад массовой скорости  $\Delta w$  в разгрузке соответствует в пределах погрешности таковому оцененному для  $\beta$ -фазы, что говорит об отсутствии фазового перехода. А при давлении нагружения 50 ГПа  $\Delta w$  лежит между величиной перепада скорости для  $\beta$ -фазы и с-фазы, что говорит о не полном превращении. Неполное превращение даже при 50 ГПа, вероятно, обусловлено сильным разогревом пористых образцов, влияющим на кинетику фазового перехода.

## СВОЙСТВА И МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ ОБЪЕМНЫХ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Альмов М.И.

ИМЕТ РАН, Москва

alymov@imet.ac.ru

Объемные нанокристаллические материалы получают, в основном, методами порошковой металлургии, кристаллизацией из аморфного состояния и интенсивной пластической деформацией. Физико-механические свойства нанокристаллических материалов значительно отличаются от свойств аналогов с крупнозернистой или аморфной структурой. Особенности структуры наноматериалов (размер зерен, значительная доля границ раздела и их состояние, дефектность структуры) определяются методами получения и оказывают существенное влияние на их свойства. С уменьшением размера зерна повышается прочность, в том числе, с сохранением пластичности, а также наблюдается увеличение теплоемкости и коэффициента термического расширения, значительно возрастают коэффициенты диффузии, уменьшается температура плавления. Механические свойства конструктивных наноматериалов значительно отличаются от свойств обычных крупнозернистых материалов. Истинное напряжение течения при динамическом сжатии нанокристаллического тантала больше, чем у крупнозернистого тантала в 2 раза, а относительная деформация до разрушения выше в 4 раза. Микротвердость таких материалов в 2-7 раз выше, чем твердость крупнозернистых аналогов, причем это не зависит от метода получения материала. Прочность наноматериалов при растяжении в 1,5-8 раз выше прочности крупнозернистых аналогов. Наноматериалы имеют значительные потенциальные возможности для конструкционного назначения, для применения в электронике, преобразования и хранения энергии, телекоммуникаций, информационных технологий, медицины, катализа и защиты окружающей среды.

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ДАВЛЕНИЯ МЕТАЛЛИЗАЦИИ ИОННЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Мамчуев М.О., Карпенко С.В.\*

НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик

\*sv\_karpenko@mail.ru

В работе рамках метода функционала электронной плотности (МФП) проведено изучение фазового перехода «диэлектрик-металл» в галогенидах щелочных металлов в условия сверхвысоких давлений.

При нулевом внешнем давлении у щелочно - галогидных кристаллов (ЩГК) стабильной является структура типа NaCl (B1). При достижении точки полиморфного превращения, происходит фазовый переход к структуре типа CsCl (B2-структура). В малой окрестности давления металлизаций  $met$ , термодинамические потенциалы диэлектрической и металлизированной фаз равны, при дальнейшем увеличении давления более стабильной становится металлизированная фаза. Давление металлизаций можно определить из условия равенства термодинамических потенциалов диэлектрической и металлизированной фаз:

$$G_1 = G_2$$

Проведя процедуру минимизации термодинамических потенциалов диэлектрической и металлизированной фаз, можно рассчитать межионное расстояние при данном внешнем давлении для ряда щелочно - галогидных кристаллов с учетом поверхностного вклада [1]. Далее, используя экспериментальные зависимости постоянной решетки от внешнего давления проводилось определение давления фазового превращения.

Для расчета термодинамического потенциала металлизированной фазы используется (для объемной части) модель Гомбоша [2, 3], а также модель желе [2] (для расчета поверхностного вклада в потенциал). Построение термодинамического потенциала для диэлектрической фазы подробно описано в работе [1]. Для металлизированной фазы полный термодинамический потенциал имеет вид

$$G_2 = G_{mV} + AN + 6d_m^2\sigma_m N$$

в котором  $A$  – потенциал родства электрона хлору,  $N$  – число пар ионов разного знака в исходном кристалле,  $d_m$  – сторона куба кристалла во второй фазе,  $G_{mV}$  - объемная часть термодинамического потенциала второй фазы,  $\sigma_m$  - поверхностная энергия металлизированной фазы. Поверхностная энергия металлизированной фазы рассчитывается в модели желе без учета вклада ионной подрешетки и дискретности ионов.

Результаты расчета давлений, при которых осуществляется фазовый переход диэлектрик-металл, проведенного в рамках метода функционала электронной плотности, показывает, что порядок давления, создаваемого в диэлектриках (в частности в ЩГК) при оптическом пробое под влиянием мощного лазерного импульса, совпадает с давлением всестороннего сжатия, при котором происходит металлизация вещества [4]. Оптический пробой ионных диэлектриков может являться следствием скачкообразного сужения запрещенной зоны в интенсивном поле световой волны за счет радиационного давления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия отечественной науке.

1. Карпенко С.В., Темроков А.И. // Оптика и спектроскопия.2003.Т.94. Вып.3.С.431.
2. Ухов В.Ф., Кобелева Р.М., Дедков Г.В., Темроков А.И. Электронно-статистическая теория металлов и ионных кристаллов. М.: Наука, 1982. 104 с.
3. Feldman J.L., Klein B.M., Mehl M.J. // Phys.Rev.B. 1990. V.42. P.2752.
4. Маненков А.А. , Прохоров А.М. // Успехи физических наук. 1986. т.148. вып.1. С.179.

## МОДЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ ЗАВИСИМОСТИ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПЕРИКЛАЗА (MgO) ОТ ДАВЛЕНИЯ

Голышев А.А.\*, Молодец А.М.

ИПХФ РАН, Черноголовка

\*golyshev@icp.ac.ru

В последние годы появились работы [1], в которых измерены коэффициенты теплопроводности  $k$  минералов (оливин, вадслеит, рингвудит) при высоких давлениях  $P$  и температурах  $T$  в виде  $k=k(T,P)$ . Авторы [1] предложили эмпирическое описание закономерностей  $k=k(T,P)$ . При этом установлено, что зависимость коэффициента теплопроводности минералов от температуры определяется степенной зависимостью  $k \sim T^{-n}$ , где  $n \approx 0.5$ , а зависимость  $k$  от давления – линейна. Однако представляет интерес модельное описание этих эмпирических закономерностей.

В [2] работе дана интерпретация температурной зависимости коэффициента теплопроводности на основе модифицированной формулы [2] Дугдала-МакДональда для некоторых порообразующих оксидов (MgO, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Как известно (см. [3]) эта формула может быть использована для анализа зависимости коэффициента теплопроводности не только от температуры, но и от давления.

В данной работе представлены модельные расчеты зависимости коэффициента теплопроводности от давления на основе формулы Дугдала-МакДональда и формулы Лейбфрида-Шлемана для периклаза. Объемные зависимости коэффициента Грюнайзена и характеристической температуры Дебая, входящие в эти формулы, а также термическое уравнение состояния периклаза построены согласно [4]. Показано, что модельные формулы дают линейную зависимость коэффициента теплопроводности периклаза от давления  $k=k_0+\alpha P$ , которая согласуется с экспериментальной [3].

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН «Физика и механика сильно сжатого вещества и проблемы внутреннего строения Земли и планет».

1. Xua Y, Shankland T.J., Linhardt S., Rubie D.C., Langenhorst F., Klasinski K. // «Thermal diffusivity and conductivity of olivine, wadsleyite and ringwoodite to 20 GPa and 1373 K» *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, 143–144, 2004, P.321–336.
2. Голышев А.А., Молодец А.М. Коэффициент теплопроводности тугоплавких оксидов при высоких температурах. // «Физика экстремальных состояний вещества-2006», Ред. Фортова В.Е., Ефремова В.П. и др., Черноголовка, 2006, С.26-28.
3. Yukutake H., Shimada M., Thermal conductivity of NaCl, MgO, coesite and stishovite up to 40 kbar // *Phys. Earth Planet. Inter.*, 17: 1978. P.193-200.
4. Молодец А.М., Авдонин В.В., Бабаре Л.В., Голышев А.А., Шахрай Д.В., Реконструкция Уравнения состояния и ударных адиабат твердого тела по его изотерме «Физика экстремальных состояний вещества-2006», Ред. Фортова В.Е., Ефремова В.П. и др., Черноголовка, 2006, С.21-23.

КИНЕТИКА ЛАЗЕРОИНДУЦИРОВАННЫХ ПРОЦЕССОВ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Кучеренко М.Г.

ОГУ, Оренбург

clibph@yandex.ru

В ряде случаев, трансформация энергии электронного возбуждения в нанодисперсных молекулярных системах зависит от пространственной структуры их надмолекулярного каркаса. В цикле систематических исследований, посвященных объектам с указанной спецификой, основное внимание уделено лазероиндуцированным бимолекулярным реакциям в пористых матрицах (оксиды металлов и  $Si$ ), коллоидных растворах и адсорбированных на твердых подложках макроцепях биологических и синтетических полимеров. Особый интерес вызывали нелинейные (по накачке) процессы с участием электронно-возбужденных органических молекул (полиацены и красители на их основе) и молекул  $O_2$  ( $^3\Sigma_g^-, ^1\Delta_g$ -состояния), насыщающих наноструктуры из атмосферы. Отдельное направление исследований составляли индуцированные лазерным излучением термодиффузионные процессы в порах и на поверхности твердых сорбентов, а также в наноглобулах коллоидных растворов. В качестве основных экспериментальных методов использовались лазерная фотометрия, люминесцентная и фототермическая спектроскопия с временным разрешением (оптическая и люминесцентная спектрохронография) на базе твердотельного ( $Nd^{3+}$ ) и газовых ( $He - Ne$ ) лазеров.

Обнаружение структурных проявлений в кинетике фото- и термически инициированных реакций в жестко организованных и конформационно-мобильных системах потребовало использования специально разработанных математических моделей систем с ограниченной геометрией. В них учитывался коррелированный характер размещения реагентов в наноструктуре, особенности миграции мобильных молекул и конформационная динамика макроцепей - в случае полимерных растворов. Во многих задачах с миграционно-ускоренным механизмом реакций и задачах для систем с динамичной структурой нанокаркаса описание кинетики удалось осуществить на базе уравнения Фоккера-Планка с реакционными членами, задавая потенциал эффективного поля наноструктуры, чаще всего - в виде комбинации элементов "яма-барьер".

Обработка результатов измерений кинетики сигналов кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции и фосфоресценции окрашенных кислородонасыщенных структур производилась на основе соответствующих моделей, адресованных конкретным системам с определенной надмолекулярной организацией. Были исследованы пористые оксиды с нанополостями цилиндрической и сферической формы, заполненные окрашенными макроцепями в атмосфере  $O_2$ . Обнаружено экранирующее влияние макромолекулярных и сурфактантных покрытий, а также наполнителей пор, на кинетику кислородных фотореакций ( $O_2$ - тушение триплетных (Т) центров и кросс-аннигиляция  $T + ^1\Delta_g$  ( $O_2$ ) возбуждений) в адсорбционных слоях и нанодисперсиях. В докладе приведены результаты численного моделирования кинетики характерных сигналов для ряда наноструктурированных систем, а также аналитические выражения, полученные в рамках теории возмущений для случаев малых скоростей переноса энергии возбуждения (и/или быстрого конформационного движения макроцепи - для полимерных растворов). Рассмотрен канал нелинейной (по накачке) дезактивации односортовых активированных состояний в результате парной аннигиляции близкорасположенных возбужденных центров. В случае нанопористых систем со сферическими полостями выявлен эффект трехчастичных пространственных корреляций в кинетике статической дистанционной аннигиляции Т-центров. При увеличении начальной концентрации  $n_0$  Т-возбуждений в пределах от  $10^{13} \text{ см}^{-3}$  до  $10^{14} \text{ см}^{-3}$  уменьшение со временем удельной скорости  $K(t|R_p)$  бимолекулярной Т-Т-аннигиляции происходит особенно резко ( $R_p$  - радиус нанопоры  $\sim 3-10$  нм). Далее, в диапазоне концентраций  $n_0$  от  $10^{14} \text{ см}^{-3}$  и, примерно, до  $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$  падение замедляется, а в области  $\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$  - наступает насыщение. Представлены расчетные и измеренные, в результате проведенных экспериментов, графики временных зависимостей характерных люминесцентных и фототермических сигналов для систем с различной надмолекулярной структурой. Получены кинетические кривые затухания интенсивности "быстрой" и замедленной флуоресценции молекулярных меток на макроцепи, после импульсной (10 нс) инициации системы. Закон распада быстрой компоненты свечения выведен на основе представлений о бинарном самотушении возбужденных синглетных центров по диполь-дипольному механизму. Неэкспоненциальный участок кривых дезактивации приходится на отрезок от 0 до 20 нс, причем изменение коэффициента  $D$  - "диффузии в потенциале" - не влияет на кинетику свечения. Временные зависимости интенсивности замедленной флуоресценции, возникающей при взаимной аннигиляции возбужденных триплетных состояний в таких системах, оказались чувствительными к температуре, но не к изменениям коэффициента  $D$ .

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

Куксин А.Ю., Стегайлов В.В.\*, Янилкин А.В.

ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

\*stegailov@ihed.ras.ru

В данной работе представлены результаты молекулярно-динамических расчетов кинетики поверхностного плавления для различных моделей потенциала межатомного взаимодействия (потенциал Леннарда-Джонса, потенциал внедренного атома для меди, алюминия и железа) и различных ориентаций открытой поверхности. Показано существование различных характеров зависимости скорости фронта плавления от температуры  $v(T)$  в областях малых и больших перепадов. Обнаружено существование соотношения подобия для зависимости  $v(T)$ .

## ПСЕВДОБИНАРНАЯ СТРУКТУРА ЖИДКОГО УГЛЕРОДА НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ

*Башарин А.Ю.\*<sup>1</sup>, Турчанинов М.А.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва*

*\*ayb@iht.mpei.ac.ru*

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование структуры жидкого углерода низкой плотности с температурой  $T_{TT} \approx 5000$  К, соответствующей по фазовой диаграмме температуре в его тройной точке, показало, что ж-С является смесью графитоподобных углеродных кластеров с координацией  $n_c = 3$  и карбиноподобных с линейными связями атомов углерода с  $n_c = 2$  [1].

Концентрация компонентов в таких неупорядоченных смесях не постоянна, а изменяется так, чтобы при каждом наборе параметров  $P, T$  обеспечивался минимум потенциала Гиббса, что характеризует их как псевдобинарные растворы. Возникновение специфических растворов в жидком состоянии присуще не только углероду, но также воде, S, Se, Te, P, I и некоторым другим чистым веществам. Для жидких S, Se характерны линейные молекулы с координацией  $n_c = 2$  в качестве одного из компонентов псевдобинарного раствора.

В работе показана применимость модели, для объяснения наблюдаемых в эксперименте дендритных форм неравновесной кристаллизации жидкого углерода низкой плотности. Проводится аналогия между образованием карбина и кристаллизацией метастабильных фаз при неравновесном затвердевании сплавов при сравнимых скоростях охлаждения жидкой фазы  $10^{-6}$  К/с.

1. Galli G., Martin R., M., Car R., Parinello M. Ab initio calculation of properties of carbon in the amorphous and liquid states // Phys. Rev. B., 1990. V. 42. № 12. P. 7470.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ МЕТОДОМ ПЕРВОПРИНЦИПНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ: ЖИДКИЙ ЦЕЗИЙ

*Гельчинский Б.Р.\*<sup>1</sup>, Мирзоев А.А.<sup>2</sup>, Дюльдина Э.В.<sup>3</sup>*

*<sup>1</sup>ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, <sup>2</sup>ЮУрГУ, Челябинск, <sup>3</sup>МГТУ им. Г. И. Носова, Магнитогорск*

*\*brg47@list.ru*

В работе [1] нами проведено сравнение результатов моделирования структуры жидкого цезия в широком диапазоне температур методами обратного Монте-Карло (ОМК) [2] и методом Шоммера [3] по данным дифракционного эксперимента. Несмотря на то, что парные корреляционные функции  $g(R)$  в обоих подходах с высокой точностью воспроизводят одну и ту же экспериментальную кривую, было показано имеющееся различие построенных моделей при температуре плавления. Это различие выявлено путем статистико-геометрического анализа многогранников Вороного, образованных атомными конфигурациями в моделях, построенных разными методами. В настоящей работе мы представляем результаты исследования структуры, атомных и электронных свойств жидкого цезия методом первопринципной молекулярной динамики, полученных в широком диапазоне температур от точки плавления до околос критической области с помощью пакета программ SIESTA [4]. Проведено обсуждение результатов и сравнение распределений топологических характеристик многогранников Вороного структуры моделей расплавов, построенных как методом первопринципной так и классической молекулярной динамики, а также методом ОМК, рассмотрены результаты расчета коэффициентов диффузии, а также расчет электронной плотности в сравнении с результатами, полученными в рамках метода сильной связи (ЛМТО).

1. Smolin N.P., Gelchinski B.R., Mirzoev A.A., Dyulдина E.V. The analyze of the short-range-order atomic structure of liquid metals by the Voronoi polyhedron method and check of the adequacy of the results gained by the RMC method // Journ. of Non-Crystalline Solids. 2002. V.312-314. P.90-94.
2. MacGreevy R.L., Pusztai L. Reverse Monte Carlo Simulation: a new technique for the determination of disordered structures // Mol.Simulation. 1988. V.1. P.359-367.
3. Schommers W. Pair potential in disordered many-particle systems: A study for liquid gallium. // Phys. Rev. A. 1983. V.28. №6. P.3599-3605.
4. 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.12. P.2745-2779.

## О ВЛИЯНИИ ТЕПЛОВЫХ ВАКАНСИЙ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И УСТОЙЧИВОСТЬ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ КРИСТАЛЛОВ

*Зубов В.И.*

*РУДН, Москва*

*v.zubov@yahoo.com.br*

Возвращаясь к исследованию вакансий в простых ван-дер-ваальсовых кристаллах, [phys. stat. sol. (b) 101, 95 (1980)] мы учитываем возможность образования их связанных комплексов, в частности бивакансий. Используется корреляционный метод несимметризованного самосогласованного поля, позволяющий включить сильный ангармонизм колебаний решетки. Рассчитаны параметры образования вакансий, концентрации вакансий и бивакансий в твердом аргоне и вклады дефектов в равновесные термодинамические свойства в зависимости от температуры и давления, причем вклады в компоненты тензора упругости изучаются впервые. Исследуется также влияние вакансий на термодинамическую устойчивость кристаллической решетки.

## ОСОБЕННОСТИ КАВИТАЦИИ ЖИДКОСТИ ВБЛИЗИ ТЕМПЕРАТУРЫ ЗАМЕРЗАНИЯ

*Сосиков В.А.\* , Уткин А.В.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка*

*\*vaso@icp.ac.ru*

Согласно теоретическим представлениям, жидкости способны выдерживать очень большие растягивающие напряжения, достигающие 1 ГПа [1], при этом предполагается, что разрушение происходит по механизму гомогенного зародышеобразования. Однако, на практике нарушение сплошности жидкости начинается при гораздо меньших величинах отрицательного давления. Это связывается, в первую очередь, с тем, что в реальных жидкостях присутствует большое количество гетерогенных зародышей, на которых и инициируется рост пор. Приблизиться к условиям разрыва жидкостей при гомогенном зародышеобразовании можно, используя динамическое растяжение. В данной работе для этой цели применяется метод анализа откольных явлений при отражении импульсов сжатия от свободной поверхности исследуемого вещества.

Большой интерес представляет изучение прочности жидкости вблизи температуры плавления, т.к. именно в её окрестности проявляются некоторые особенности разрушения. В данной работе были проведены эксперименты с водой при начальной температуре около 0<sup>0</sup>С, а также с гексадеканом и пентадеканом имеющими температуру плавления 18 и 10<sup>0</sup>С соответственно. Данные экспериментов по определению откольной прочности воды и её зависимости от скорости деформирования вблизи точки замерзания показывают, что существует сильное влияние скорости деформирования на прочность воды в окрестности нулевой температуры. При этом, откольная прочность воды изменяется от 21 до 49 МПа при изменении скорости деформирования от 1,8 до 5,3 1/мкс. При этом, ранее при исследовании откольной прочности воды при начальной температуре порядка 19<sup>0</sup>С зависимости величины откольной прочности от скорости деформирования не наблюдалось [2]. Также было показано, что при импульсном растяжении воды в окрестности нулевой температуры реализованы состояния, соответствующие области двойной метастабильности.

Эксперименты с пентадеканом показали, что при увеличении амплитуды падающего импульса в 2 раза (с 193 МПа до 416 МПа) величина откольной прочности также увеличивается примерно в 2 раза (с 26 до 41 МПа). Для гексадекана данная зависимость обратна и при увеличении амплитуды падающего импульса (с 175 МПа до 510 МПа) величина откольной прочности уменьшается (с 18 до 11 МПа). Кроме того, в гексадекане разрушение происходит двухстадийно, аналогично тому, как ранее было обнаружено в этиловом спирте [3].

Таким образом, результаты экспериментов с гексадеканом и пентадеканом показали, большую чувствительность жидкостей, находящихся вблизи точки замерзания к условиям нагружения. Кроме того, обнаружено, что в гексадекане разрушение является двухстадийным, аналогично найденному ранее в этиловом спирте.

1. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. М.: Наука, 1972..
2. Богач А.А., Уткин А.В. Прочность воды при импульсном растяжении // Прикладная механика и техническая физика. 2000. Т.41, №4. С. 198-205
3. А.В.Уткин, В.А.Сосиков, Импульсное растяжение этилового спирта при ударно-волновом воздействии. ПМТФ. 2005. Т.46, № 4, С.29-38.

## РАСПРОСТРАНЕНИЕ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ В ПРОВОЛОЧНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ NbTi И NbZr

*Беспалов Е.В.\*<sup>1</sup>, Вяткин В.С.<sup>2</sup>, Дорофеев Г.Л.<sup>2</sup>, Ефремов В.П.<sup>1</sup>, Красноперов Е.П.<sup>2</sup>, Куроедов Ю.Д.<sup>2</sup>, Фортнов В.Е.<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup> ИТЭС ОИВТ РАН, <sup>2</sup> РНЦ КИ, Москва*

*\*bev@ihed.ras.ru*

Увеличивающиеся потребности в энергетических мощностях требуют перехода на более энерго и тепло сберегающие технологии. В этой связи переход на сверхпроводящие линии электропередач на электростанциях приводит к уменьшению потерь вследствие теплового резистивного нагрева этих линий. Однако при этом изменяются и требования к безопасности таких систем. Целью работы является исследование неустойчивостей, которые могут возникнуть и развиваться в таких системах.

В данной работе предложен механизм распространения нормальной фазы в сверхпроводниках в условиях, близких к критическим (значения транспортного тока  $j$ , протекающего по образцу, близки к пороговым значениям). Иницированная локальным изменением внешнего магнитного поля, движущаяся волна разрушения термомагнитной неустойчивости (ДВРМН) нагревает поверхностный слой сверхпроводника, инициируя тем самым возникновение нормального (резистивного) состояния образца (нормальной фазы), которая движется вдоль проволоочки со скоростью ДВРМН. Эта скорость по величине больше скорости звука в образце из NbZr и достигает значения 11 км/с при плотности тока  $j$ : 10<sup>9</sup> А/м<sup>2</sup>. Для NbTi скорость распространения нормальной фазы достигает 3 км/с при плотности тока  $j$ : 10<sup>9</sup> А/м<sup>2</sup>. При этом процесс носит лавинообразный характер и является самоподдерживающимся. Возможность существования и регистрации значительно больших скоростей (200 км/с) интенсивно обсуждается в литературе [1], [2] и др.

Само движение волны разрушения термомагнитной неустойчивости тоже представляет интерес для исследования. В ранних экспериментах большая ширина регистрирующего импульса показала, что характерная продольная скорость ДВРМН в несколько раз выше, чем скорость диффузии поля внутрь проводника. Однако, профиль этой волны определен не был, хотя его вид, несомненно, важен для теории распада неустойчивого состояния. В данной работе впервые опробована одновитковая регистрация магнитного потока ДВРМН. Толщина витка – 50мкм. Были измерены параметры импульсов, и в рамках модели критического состояния определена форма раздела фаз (неустойчивой и равновесной) при ДВРМН. Планируется изучение влияния способов инициирования возмущения, приводящего к ДВРМН, а также изучение структурных изменений в результате движения нормальной фазы и ДВРМН.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований РАН «Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий».

1. B. Biehler, B.-U. Runge, S. C. Wimbush, B. Holzapfel and P. Leiderer. Velocity measurements of the dendritic instability in YNi<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C. // Supercond. Sci. Technol. 18, 2005, P. 385-387.
2. B.-U. Runge, U. Bolz, J. Boneberg, V. Bujok, P. Brühl, J. Eisenmenger, J. Schiessling, and P. Leiderer. Magneto-Optic Characterization of Defects and Study of Flux Avalanches in High-Tc Superconductors down to Nanosecond Time Resolution. // The international journal Laser Physics, Vol. 10, 1, 2000, P. 53-59.

## ВЛИЯНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА АККОМОДАЦИИ НА ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ КРИТИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ

*Черевко А.Г.*

*СибГУТИ, Новосибирск*

*cherevko@mail.ru*

Классическая теория нуклеации не рассматривает температурные флуктуации, определяемые тепловым излучением кластера. В тоже время, при высоких температурах энергия кванта теплового излучения может составлять десятки доли электроновольта, что достаточно для уменьшения температуры кластера ниже температуры перехода и перевода закритического кластера в докритический. Температурные флуктуации, связанные с теплообменом излучением наблюдались экспериментально в нагретых до высоких температур тонких проволоках [1]. Время корреляций этих флуктуаций для кластера из  $g$  молекул с площадью поверхности  $S$  - равно [1]:

$$\tau_\gamma = \frac{m_0 g c_v}{4 S \varepsilon \sigma T^3}$$

где  $m_0$  - масса молекулы пара,  $c_v$  - удельная изохорная теплоемкость,  $\varepsilon$  - излучательная способность кластера,  $\sigma$  - постоянная Стефана - Больцмана. Для системы жидкость - пар германия  $\tau_\gamma \sim 10^{-7} c$ . Среднеквадратическое значение температурных флуктуаций равно:

$$\Delta t_{rms} = \sqrt{\frac{kT^2}{m_0 g c_v}}$$

Характерное время установления стационарного распределения зародышей по размерам для перегретой жидкости  $10^{-9}$  [2], что много меньше времени корреляции температурных флуктуаций, поэтому рассмотрение можно проводить, считая процесс квазистационарным. Распад критических кластеров определяется его столкновением с молекулами среды. Время между столкновениями равно:

$$\tau_c = \frac{4}{n \bar{v} S \eta}$$

где  $n$  - концентрация молекул,  $\bar{v}$  - их средняя скорость,  $\eta$  - коэффициент аккомодации. Температурные флуктуации будут оказывать влияние на процесс нуклеации, если одновременно выполняются следующие два условия:

$$\Delta t_{rms} \geq \Delta T; \quad \tau_\gamma > \tau_c$$

где  $\Delta T$  - отклонение температуры среды от температуры перехода  $T_0$ . Учитывая соотношение для размера критического зародыша [2], обозначая  $\alpha = \sigma^* S g^{-2/3}$ , где  $\sigma^*$  - поверхностное натяжение, из предыдущей формулы получаем границы диапазона переохлаждения и перегрева, в которых **следует ожидать** влияния температурных флуктуаций на процесс зародышеобразования:

$$\frac{m_0 c_v}{k} \left( \frac{2\alpha}{3\lambda} \right)^3 \leq \frac{\Delta T}{T} \leq \frac{2\alpha}{3\lambda} \left( \frac{1}{16} \frac{n \bar{v} \eta m_0 c_v}{\varepsilon \sigma T^3} \right)^{1/3}$$

Как видно, влияние температурных флуктуаций в высокотемпературной области определяется отношением потоков вещества к потоку теплового излучения кластера (правый член неравенства). Как следует из неравенства, температурные флуктуации **не влияют** на процесс нуклеации при следующих коэффициентах аккомодации:

$$\frac{\eta}{\varepsilon} \leq \left( \frac{2\alpha}{3\lambda} \right)^6 \left( \frac{m_0 c_v}{k} \right)^2 \frac{16 \sigma T^3}{k n \bar{v}}$$

Расчет показывает, что для Hg температурные флуктуации не следует учитывать при  $\eta/\varepsilon < 0.5$ ; Ge -  $\eta/\varepsilon < 0.1$ .

1. Milatz J.M.W, Van der Velden H.A. Natural limit of measuring radiation with a bolometer. // Physica. 1943. v.10. № 36. P.369-380.
2. V. P. Skripov, M. Z. Faizullin: Crystal-Liquid-Gas Phase Transitions and Thermodynamic Similarity, WILEY-VCH, Berlin-Weinheim, 2005. 245 p.

# О ВОЗМОЖНОМ МЕХАНИЗМЕ В1-В2 ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Карпенко С.В.<sup>\*1</sup>, Савинцев А.П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>НИИ ПМА КБНЦ РАН, <sup>2</sup>КБГУ, Нальчик

\*sv\_karpenko@mail.ru

В настоящей работе сделана попытка построить схему реконструктивных фазовых превращений, протекающие в кристаллах под действием высокого давления, опираясь на теорию протекания [1] и гипотезу подобия [2], успешно используемые в теории фазовых переходов второго рода.

Согласно нашей модели фазовый переход начинает развиваться в поверхностной области кристалла. Как известно, внешнее давление изменяет соотношение между радиусами частиц, слагающих элементарную ячейку, что приводит к изменению кристаллической сингонии, так как энергетически выгоднее становится более плотноупакованная структура. Подобная трансформация с большей вероятностью может произойти на поверхности кристалла. В результате возникает зародыш новой фазы, который представляет собой макроскопическое образование со счетным числом частиц (кластер). Зарождение кластеров происходит стохастически вблизи дефектных областей поверхности.

При увеличении числа частиц новой фазы начинается образование конгломератов из частиц, в терминах теории фракталов - кластеров. Законы образования таких кластеров нам неизвестны, однако, можно предположить, что первоначально протекают наиболее быстрые процессы, которые отвечают образованию кластеров с минимальной энергией связи, то есть отвечающие преодолению барьеров минимальной высоты  $Q_{\alpha\beta}$  [3]. После завершения этого этапа начинают складываться кластеры, энергия образования которых больше. Эти образования состоят из большего числа частиц, чем образовавшиеся на предыдущей энергетической стадии. При увеличении концентрации новой фазы данный процесс может идти вплоть до  $x = 1$ , где  $x$  - концентрация образующейся фазы в системе. В пределах определенного строения кластеров (число частиц, конфигурация) и их энергии связи можно выделить тот или иной класс, или уровень, к которому можно отнести данный кластер. Классификацию таких уровней можно вести как по строению кластеров, так и по величине энергии их образования и распространить ее не только на отдельные кластеры, но и на всю систему "фаза низкого давления - фаза высокого давления" в целом.

Вполне естественно предположить, что ряд уровней будет обладать физическими свойствами, отличными от кластеров предыдущих или последующих уровней. Данное различие может проявиться в электрических, термодинамических и других свойствах системы. Например, в случае перекрытия геометрических областей кластеров образуется проводящая цепочка, которая изменяет характер теплофизических свойств всей системы, а также позволяет провести идентификацию фазы высокого давления.

Пока расстояние между двумя ближайшими кластерами меньше некоторого критического, характеризующего радиусом корреляции, который определяется согласно выражению  $\frac{4\pi}{3}\rho^3 = \bar{n}\nu$  ( $\nu$  - среднее число узлов в кластере,  $\nu$  - средний объем, приходящийся на частицу в кластере), критическая доля объема  $\xi$  новой фазы недостаточна для образования нового кластера. Существует критическое значение  $\xi_c$  объема новой фазы, определяемое следующим образом  $\xi_c = \frac{\Delta_0}{\nu_0} \left(\frac{z}{1.5}\right)^{1/(az)}$ . При  $\xi = \xi_c$  начинается слияние кластеров, которое приводит к образованию канала протекания. Слияние последних образует тонкую пленку новой фазы.

В дальнейшем процесс развивается внутрь образца, приводя к появлению кластеризованных областей новой фазы по всему объему кристалла.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия отечественной науке.

1. Шкловский Р.Э., Эфрос А.Л. // УФН. 1975. т. 117. с. 401.
2. Hankey A., Stanly H.E. // Phys. Rev. 1976. v. 6. p. 3515.
3. Олемской А.И., Фиат А.Я. // УФН. 1993. т. 163. № 12. с. 3.
4. Buerger M.J. // Proc. Of the Symp. On Mechanisms of pphase transition. N.Y., 1971. V. 7. P. 1.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ ОКСИДОВ ЩЕЛОЧНО-ЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ, НАХОДЯЩИХСЯ В УСЛОВИЯХ ЗЕМНЫХ НЕДР

Карпенко С.В.<sup>\*1</sup>, Савинцев А.П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>НИИ ПМА КБНЦ РАН, <sup>2</sup>КБГУ, Нальчик

\*sv\_karpenko@mail.ru

Проблема построения адекватной теории ядра Земли, несмотря на значительные успехи в данной области, далека от полного решения. Один из важных моментов - описание свойств веществ земных недр, находящихся при сверхвысоких давлениях и температурах. В данной работе проводится анализ зонной структуры сжатых кристаллов оксидов щелочно-земельных элементов, которые в большом количестве распространены в земных породах. Теоретическое исследование энергетического спектра кристалла в широкой области изменения объема в настоящее время иницируется экспериментальными работами, в которых наблюдается переход кристаллов в металлическое состояние [1, 2]. Существующие расчеты зонной структуры сжатых кристаллов противоречивы, причем, даже выполненные в рамках одного и того же метода [3, 4]. Поэтому построение микроскопической зонной структуры сейчас особенно актуально. Примем за волновую функцию кристалла  $\Psi$  кристалла антисимметризованное произведение волновых функций  $\phi^l$  изолированных атомов, взятых в приближении Хартри - Фока. При этом псевдволновые функции  $\alpha_k(\vec{r})$  получают взаимной ортогонализацией функций  $\phi$  электронов изолированных атомов. При больших сжатиях (когда  $S \sim 0.1$ ) данное приближение становится недостаточным, однако мы считаем, что общая тенденция изменения энергетического спектра сохранится, если ранее не произойдет структурное превращение в кристалле.

До значений  $\frac{\Delta V}{V_0} = 0.3$  изменение  $S_c$ , а также энергий во всех точках ЗБ (зоны Бриллюэна), можно считать линейным, при этом дисперсионные кривые  $E_\alpha$  остаются плавными и монотонными. Полученные результаты свидетельствуют о значительной деформации границы зон проводимости с ростом давления.

Наибольший интерес представляют рассчитанные в работе уровни энергии дырочной зоны. Нами использовано предположение о том, что изъятие одного электрона из замкнутой  $2p$ -орбитали слабо изменяет состояние всех

остальных. Особенностью поведения рассчитанных зон под давлением является монотонный рост всех ветвей электронного спектра по всей ЗБ при изменении объема кристалла до  $\frac{\Delta V}{V_0} \approx 0.3$  и быстрое уменьшение энергии валентного электрона на границе ЗБ при дальнейшем сжатии. Такое поведение зоны проводимости обусловлено резкой анизотропностью вклада слагаемых, пропорциональных интегралу перекрытия, в различных точках ЗБ. Результаты расчета энергетических щелей  $E_G(X_n - K_{15})$ ,  $E_G(L_n - K_{15})$  при различных степенях сжатия:

$$E_G(X_n - K_{15}) = M_0 - \frac{1}{2}\Delta_k + E(K_1),$$

$$E_G(L_n - K_{15}) = E_G(K_1 - K_{15}) + E_G(L_n - K_1),$$

позволяют сделать вывод о том, что переход в металлизированное состояние произойдет не ранее  $\frac{\Delta V}{V_0} \approx 0.75$ , что соответствует давлению 5 - 25 Мбар для различных рассматриваемых в работе кристаллов. Это значение является оценочным, так как точность расчетов ограничена приближением низшего порядка по  $V_{ex}$  и  $V_{pk}$ . Сам факт значительности роли обменно-корреляционных вкладов при сжатиях, больших  $\frac{\Delta V}{V_0} \approx 0.5$ , говорит о том, что при дальнейшем сжатии следовало бы учитывать в расчетах весь ряд по интегралу перекрытия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия отечественной науке.

1. Срибная В.К., Толыго К.Б. // ФНТ. 1980. Т. 6. № 3. С. 366.
2. Нама J. // Phys. Lett. 1984. V. 105A. № 6. P. 303.
3. Nelson D.A., Ruoff A.L. // Phys. Rev. Lett. 1979. V. 42. № 6. P. 1879.
4. Hawke P.S., Burgess T.J., Duerre D.E., Huebel J.G. // Phys. Rev. Lett. 1978. V. 41. № 10. P. 994.

**РАСЧЕТЫ УДАРНЫХ АДИАБАТ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ГАЗОВОЙ (ФЛЮИДНОЙ)  
ФАЗЫ НА ОСНОВЕ ПОТЕНЦИАЛОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ**

*Губин С.А.\*, Викторов С.Б., Богданова Ю.А.*

*МИФИ, Москва*

*\*gubin@interphysica.ru*

При решении практических задач в различных областях науки и техники часто возникает необходимость в расчете состава и термодинамических параметров многокомпонентных химических систем, находящихся под воздействием высоких давлений и температур. Если температуры и давления ударных волн в многокомпонентных газообразных смесях превышают критические параметры компонентов, то такие вещества называют флюидами, а их смеси – флюидными смесями. Знание термодинамических свойств таких систем требуется в геофизике, в астрофизике (при моделировании атмосфер и недр планет), в физике и химии детонационных и ударных волн.

В настоящей работе для термодинамического моделирования состояний флюидов и их смесей в сильных ударных волнах применялись теоретически обоснованные УРС плотных флюидов, построенные на базе современного аппарата теорий возмущения и потенциалов межмолекулярных взаимодействий вида Ехр-6, реалистичность которых в области высоких давлений и температур можно считать доказанной.

Использовался модифицированный вариант теории возмущения (KLRR теория), который обеспечивает хорошее согласие рассчитанных по ней избыточных значений энергии Гельмгольца, внутренней энергии и давления с соответствующими результатами прямого компьютерного моделирования методами Монте-Карло и молекулярной динамики вплоть до высоких плотностей флюида.

Модификация теории KLRR состояла в применении гладкой, зависящей от плотности функции для точки разрыва исходного потенциала на базисный и возмущающий потенциалы, вместо используемой в оригинальной теории двух-кусочной функции, которая не является непрерывно дифференцируемой, что приводит к наличию физически необоснованных разрывов у производных избыточной энергии Гельмгольца по плотности, в частности, у коэффициента изотермической сжимаемости. Модифицированный вариант теории лишен этого недостатка и обеспечивает отличное согласие с компьютерными экспериментами Монте-Карло.

По имеющимся экспериментальным данным по статическому и динамическому сжатию были найдены параметры потенциалов Ехр-6 для основных продуктов разложения органических веществ в ударных волнах. Параметры Ехр-6 для пар одноименных молекул определялись из условия наилучшего согласия с имеющимися экспериментальными данными по статическому и ударно-волновому сжатию веществ.

Все расчеты выполнялись с помощью разработанного в МИФИ компьютерного термодинамического кода широкого назначения TDS. В этом коде для моделирования свойств многокомпонентного флюида, которым и являются продукты разложения органических соединений, применяется модель Ван-дер-Ваальса, позволяющая найти эффективный однокомпонентный потенциал, соответствующий рассматриваемой реальной многокомпонентной системе. Предлагаемая теоретическая методика совместно с кодом TDS являются инструментальными средствами для термодинамического моделирования состояний вещества при высоких давлениях и температурах с учетом диссоциации и ионизации молекул, расслоения многокомпонентных флюидов на несколько фаз и т.д.

Расчёты показали, что разработанная методика термодинамического моделирования ударных волн обеспечивает отличное согласие с экспериментальными данными, причем это согласие лучше, чем при использовании полуэмпирических УРС.

Таким образом, при решении прикладных задач физики ударных волн применение УРС, построенных на базе реалистичных потенциалов взаимодействия молекул и имеющих достаточно строгое обоснование в статистической механике и молекулярной динамике, может дать более надежные результаты, чем при использовании даже лучших из полуэмпирических УРС.

**МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ПРОЦЕССА ДЕТОНАЦИИ ЖИДКИХ ВВ НА ОСНОВЕ  
МОДЕЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ МНОГОАТОМНЫХ  
МОЛЕКУЛ**

*Смирнов А.Л.\*, Каркач С.П., Скребков О.В., Дремлин А.Н.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка*

*\*asm2@mail.ru*

Метод молекулярной динамики с применением простейших поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) ранее использовался для изучения структуры зоны колебательной неравновесности в ударной волне в жидкости многоатомных молекул [1]. Были сделаны предположения об особенностях протекания химических реакций в этой зоне.

В данной работе используется простейшая ППЭ для многоатомных молекул, допускающая мономолекулярную реакцию. В пространстве колебательных координат она имеет вид двух минимумов с плавным переходом через перевал между ними. Частоты колебаний в минимумах соответствуют нормальным модам исходной и конечной молекул, разница уровней дает тепловой эффект реакции, а высота барьера – энергию активации. Параметры внутримолекулярной ППЭ зависят от межмолекулярных взаимодействий.

Выполненные численные расчеты показали возможность моделирования процессов инициирования детонации ударной волной или локальным нагревом. Исследованы процессы обмена колебательной энергией в стационарной детонационной волне, которая имеет следующую типичную структуру. Вблизи ударного скачка происходит колебательное возбуждение реагентов, стимулирующее химическую реакцию. Энергия выделяется в виде внутренней колебательной энергии продуктов, а затем в процессе релаксации переходит в поступательную и далее в механическую энергию потока. Представлены результаты расчетов, демонстрирующие различия в протекании химических реакций в условиях ударно-волнового нагружения для веществ, имеющих одинаковое поведение в статических условиях. Для этого исследован ряд ППЭ, инвариантных для традиционного метода переходного состояния.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-03-32676).

1. Смирнов А.Л., Каркач С.П., Скребков О.В., Дремин А.Н. // Физика экстремальных состояний вещества – 2006 / Под ред. Фортова В.Е. и др.. Черногловка: ИПХФ РАН. 2006. С.143.

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В МЕТАНЕ

*Боле́ста А.В.\*<sup>1</sup>, Томпсон Д.Л.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИТПМ СО РАН, Новосибирск, Россия, <sup>2</sup>UMC, Missouri, Columbia, USA

\*bolesta@itam.nsc.ru

Важным элементом молекулярно-динамических исследований ударно-волновых явлений в реагирующих средах является разработка потенциалов межатомного взаимодействия, способных предоставить реалистичное описание химических процессов, происходящих в условиях высоких температуры и давления. Стюартом с соавторами [1] был предложен адаптивный межмолекулярный реактивный эмпирический потенциал с учетом порядка связи (AIREBO), который может быть использован для моделирования химических реакций и межмолекулярного взаимодействия в конденсированных водород-углеродных системах. Мы представляем результаты молекулярно-динамического моделирования распространения ударной волны в твердом и жидком метане с помощью потенциала AIREBO. Сравнение с экспериментальными данными для жидкого метана показало, что AIREBO значительно переоценивает давление и вызывает меньшую степень сжатия среды за фронтом ударной волны. В то же время температура за фронтом предсказывается достаточно хорошо. Вычисленный порог разложения метана также хорошо согласуется с экспериментальными данными. Предложен и опробован метод минимизации волны, отраженной от задней части расчетной ячейки.

1. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. // J. Chem. Phys. 2000. V.112. P.6472.

## ВЛИЯНИЕ ДИСПЕРСНОСТИ И НАЧАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ НА СТРУКТУРУ ДЕТОНАЦИОННОЙ ВОЛНЫ В ПРЕССОВАННОМ TNETV

*Уткин А.В.\* , Мочалова В.М.*

*ИПХФ РАН, Черногловка*

\*utkin@icp.ac.ru

Экспериментальные исследования показывают, что характер изменения параметров в зоне реакции стационарной детонационной волны существенно зависит от структуры заряда. С целью изучения этого явления были проведены эксперименты по регистрации стационарных детонационных волн в прессованном взрывчатом веществе TNETV при различной начальной плотности зарядов и двух различных дисперсностях исходного порошка: грубодисперсного (с характерным размером частиц 80 мкм) и мелкодисперсного (характерный размер частиц 5 мкм). В экспериментах с помощью лазерного интерферометра регистрировалась массовая скорость движения фольги на границе с прозрачными окнами. Отработана методика регистрации волновых профилей с использованием LiF окон, которая подтвердила, что все качественные особенности, наблюдаемые при использовании Al фольг 200 мкм и водяного окна, достоверно отражают структуру детонационной волны. Одновременно с массовой скоростью измерялась скорость детонации D.

Показано, что существует интервал начальных плотностей, внутри которого химик отсутствует, а вне его регистрируется классическая структура детонационной волны с химиком. Этот диапазон определяется кинетикой реакции ВВ и существенно зависит от дисперсности исходного порошка, поскольку разложение гетерогенных сред носит очаговый характер и зависит, в частности, от размера частиц ВВ. Если в грубодисперсном порошке химик исчезает при начальной плотности, выше 1,56 г/см<sup>3</sup>, то в мелкодисперсном – при 1,3 г/см<sup>3</sup>. Возможность существования стационарной детонационной волны без химика объясняется частичным разложением ВВ во фронте волны сжатия, что не учитывается классической теорией детонации.

## КОЛЕБАНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ В ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛНАХ В ПОРОШКОВЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВАХ

*Зубков П.И.\*<sup>1</sup>, Карташов А.М.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИГиЛ СО РАН, <sup>2</sup>НГУ, Новосибирск

\*zubk@hydro.nsc.ru

Колебания поляризации в детонационных волнах в порошковых взрывчатых веществах были обнаружены при исследовании распределения потенциала в детонационной волне и при исследовании пространственной взаимосвязи волн поляризации и проводимости при детонации.

Колебания поляризации начинаются в инициирующей ударной волне и медленно затухая продолжают в волне проводимости. Длительность колебаний 100-150 нс, с характерным временем 10-15 нс, зависящим от взрывчатого вещества и его состояния.

Для выяснения природы колебаний поляризации необходимы специальные исследования.

Одной из задач доклада является привлечение внимания исследователей к обнаруженному явлению.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФИ (грант 04-02-17548).

## SHOCK COMPRESSION AND EQUATION OF STATE OF C<sub>60</sub> FULLERITE

Milyavskiy V.V.<sup>\*1</sup>, Utkin A.V.<sup>2</sup>, Khishchenko K.V.<sup>1</sup>, Yakushev V.V.<sup>2</sup>, Zhuk A.Z.<sup>1</sup>, Fortov V.E.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>IHED RAS, Moscow, Russia, <sup>2</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия

\*vlvm@ihed.ras.ru

Recently, we have experimentally studied shock compressibility of C<sub>60</sub> fullerite and sound velocity in shock-compressed fullerite at the pressure range up to ~50 GPa [1]. In this work we present the results of new shock experiments executed with C<sub>60</sub> fullerite in the same pressure range. The Hugoniot of C<sub>60</sub> fullerite had a set of peculiarities, which may be attributed to a series of polymorphic phase transitions. Formation of a rather hard carbon phase was detected at shock pressure ~9 GPa. We assume that it is a polymerized C<sub>60</sub> phase. With growth of shock pressure, destruction of this phase and formation of a graphite-like carbon occurs. With further growth of shock pressure, phase transition of the graphite-like carbon to a diamond-like phase is observed. If shock pressures higher than ~33 GPa, shock compressibility of C<sub>60</sub> fullerite is determined by the thermodynamic properties of the diamond-like carbon phase.

The results of the shock-wave measurements were used for the description of thermodynamic properties of C<sub>60</sub> fullerite using the semiempirical equation-of-state (EOS) model. The thermodynamic properties of products of C<sub>60</sub> fullerite transformations (graphite-like and diamond-like carbon phases) were described in the framework of model [2]. The EOS we have developed for fullerite C<sub>60</sub> provides a consistent representation of the available experimental data.

The work was supported by RFBR (projects No. 04-02-16471 and 06-02-17464).

1. Milyavskiy V.V., Borodina T.I., Sokolov S.N., Zhuk A.Z. Shock-induced phase transitions of C<sub>70</sub> fullerite // Diamond and Related Materials. 2005. Vol. 14. Issues 11-12. P. 1920-1923.

2. K.V. Khishchenko, V.E. Fortov, I.V. Lomonosov. Multi-phase equation of state for carbon over wide range of temperatures and pressures // Int. J. Thermophys. 2005. V. 26. Issue 2. P. 479-491.

## УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ЦЕРИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Хищенко К.В.

ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

konst@ihed.ras.ru

Предложено полуэмпирическое уравнение состояния церия с учетом полиморфных фазовых переходов, плавления, испарения и ионизации. Представлены результаты расчетов термодинамических параметров различных фаз металла в сопоставлении с имеющимися экспериментальными данными при высоких давлениях и температурах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №06-02-17464).

## КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ НЕРАВНОВЕСНОСТЬ И ЭЛЕКТРОННОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ ПРИ ИНИЦИИРОВАНИИ И РАЗВИТИИ РЕАКЦИИ ВОДОРОДА С КИСЛОРОДОМ ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ

Скребков О.В.<sup>\*</sup>, Каркач С.П., Иванова А.Н., Костенко С.С., Смирнов А.Л.

ИПХФ РАН, Черноголовка

\*skreb@icp.ac.ru

Все проводимые в настоящее время кинетические расчеты основаны на использовании предположения о наличии равновесия по внутренним (и прежде всего колебательным) степеням свободы. Наряду с приближенным характером этого предположения, отметим также и непоследовательность в его применении, в частности, к реакциям с участием радикала HO<sub>2</sub>(v) как интермедиата.

Так, в случае важнейшей реакции цепного разветвления H + O<sub>2</sub> → HO<sub>2</sub>(v) → HO + O, высокая скорость образования и распада промежуточного колебательно возбужденного радикала HO<sub>2</sub> [2] позволяет с приемлемой для приложений точностью использовать в расчетах бимолекулярный брутто процесс H + O<sub>2</sub> → HO + O. В то же время тримолекулярные низкотемпературные брутто реакции типа H + O<sub>2</sub> + H<sub>2</sub> → Продукты (фактически - HO<sub>2</sub>(v) + H<sub>2</sub> → Продукты) не учитываются/не были известны до последнего времени (при топологическом анализе этой и других молекулярных систем и количественных оценках констант скорости реакций использованы высокоточные многоконфигурационные методы ab initio расчета). В результате остается необъясненным целый ряд экспериментальных фактов, начиная с высокой интенсивности излучения электронно возбужденного радикала HO на самой начальной стадии воспламенения водорода за ударной волной [1] и заканчивая катастрофическими расхождениями между наблюдаемыми и предсказываемыми временами задержки зажигания при высоких давлениях.

При низких давлениях (до 1 атм.) характерных для большинства экспериментов в ударных трубах, большая продолжительность жизни промежуточного комплекса HO<sub>2</sub>(v) [3] приводит к существенной зависимости эффективной константы скорости важнейшей реакции цепного разветвления H + O<sub>2</sub> → HO + O от конкретных условий [4], что само по себе ставит задачу последовательного учета влияния колебательного возбуждения HO<sub>2</sub>(v) на скорость реакций с его участием. Работа посвящена расчету неравновесной реагирующей смеси водород-кислород с учетом возникающего при бимолекулярной рекомбинации радикала HO<sub>2</sub>(v), перераспределения энергии по модам, процессов колебательной релаксации. Приводятся результаты расчетов, иллюстрирующие эффективность предлагаемого подхода.

Работа поддержана РФФИ (Грант №04-03-32678) и ИИТАС (Грант №03-51-4736).

1. Belles F.E. and Lauver M.R. // J. Chem. Phys. 1964. V. 40. P. 415.
2. Mallard W. G., Westley F., Herron J. T., Hampson R. F. // NIST Chemical Kinetics Database - Ver. 6.0. NIST Standard Reference Data, Gaithersburg, MD. 1994.
3. Wadlinger R.L. and Darwent B.deB. // J. Phys. Chem. 1967. V. 71, P. 2057.
4. О.В. Скребков, С.П. Каркач. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, 2005, Том 3, <http://www.chemphys.edu.ru>

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УДАРНОЙ СЖИМАЕМОСТИ $\text{CuO}+\text{V}$ И $\text{Zn}+\text{S}$ .

*Торунев С.И.\*, Уткин А.В., Ефремов В.П., Фортвов В.Е.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка*

*\*utkin@icp.ac.ru*

В данной работе проведено исследование ударно-волновых свойств реакционно-способных смесей  $\text{CuO}+\text{V}$  и  $\text{Zn}+\text{S}$  в интервале давлений от 5 до 22 ГПа. Исходные образцы прессовались из смесей окиси меди и бора либо цинка и серы в молярном отношении 1:1 до плотности, составляющей примерно 95% от максимальной. Для исследования ударной сжимаемости образцов использовались взрывные метательные устройства, обеспечивающие плоское метание алюминиевых ударников в интервале скоростей 1 – 2.5 км/с. Скорость движения границы образец – водяное окно измерялась лазерным интерферометром VISAR. Для отражения лазерного луча на поверхность образца наклеивалась алюминиевая фольга толщиной 100-200 мкм. Одновременно с массовой скоростью измерялась скорость ударной волны  $D$ , что позволило получить ударные адиабаты смесей. Изучено влияние дисперсности частиц  $\text{Zn}$  и  $\text{CuO}$  на ударно-волновую сжимаемость смесей.

Показано, что, начиная с давления 13 ГПа ударная адиабата смеси нано-цинка с серой лежит выше ударной адиабаты смеси грубодисперсного цинка с серой. Причем, наблюдается удовлетворительная воспроизводимость этого результата. Полученные результаты могут быть объяснены, если предположить, что наночастицы цинка за время, не превышающее 100 нс, вступают в реакцию с серой.

Профили скорости в смеси  $\text{CuO}+\text{V}$  имеют достаточно сложную структуру. Непосредственно за ударным скачком регистрируется пик скорости с амплитудой несколько сот метров и длительностью 100–200 нс. Образование подобного пика может быть обусловлено как протеканием химической реакции, так и динамикой схлопывания пор в образце. Для ответа на этот вопрос были проведены эксперименты с мелкодисперсными образцами, приготовленными из исходных компонент смеси:  $\text{CuO}$  и  $\text{V}$ . Оказалось, что в обоих составах, как и в их смеси, за ударным скачком формируется характерный пик скорости, то есть, наблюдаемые особенности вызваны пористостью образцов, а не химической реакцией исходных компонентов. Таким образом, хотя для системы  $\text{CuO}+\text{V}$  выполняются необходимые термодинамические условия существования стационарной детонации, возможность реализации ее в лабораторных условиях лимитируется кинетикой взаимодействия бора с окисью меди.

## УДАРНО-ВОЛНОВОЕ НАГРУЖЕНИЕ ФУЛЛЕРЕНА $\text{C}_{70}$ С ГПУ-СТРУКТУРОЙ В ОБЛАСТИ ДАВЛЕНИЙ ДО 19 ГПа

*Соколов С.Н.\*, Милявский В.В., Бородин Т.И., Жерноклетов Д.М., Жук А.З.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва*

*\*real\_serg@mail.ru*

В работе приводятся результаты экспериментов по ударно-волновому нагружению фуллерена  $\text{C}_{70}$  монофазного (ГПУ) состава в диапазоне давлений 8-19 ГПа. Исходный поликристаллический фуллерен  $\text{C}_{70}$  (>99,5%) был изготовлен в Институте металлоорганической химии РАН (Н. Новгород). Материал содержит только ГПУ-модификацию фуллерена  $\text{C}_{70}$  с параметрами решетки  $a=1,068$  и  $c=1,737$  нм.

Для проведения экспериментов порошок фуллерена  $\text{C}_{70}$  запрессовывался в ампулы сохранения плоской геометрии. Экспериментальные сборки нагружались плоским ударом алюминиевых пластин, разгоняемых при помощи взрывных метательных устройств. Максимальные ударные давления достигались в течение нескольких циркуляций волн в образце (ступенчатое ударно-волновое сжатие) и составляли 8, 9, 14 и 19 ГПа.

В материале, сохраненном после ударно-волнового нагружения фуллерена  $\text{C}_{70}$  до давления 8 ГПа доминирующей кристаллической фазой (88% об.) являлся  $\text{C}_{70}$  с ГПУ-структурой, имеющий параметры кристаллической решетки  $a=1,065$  нм,  $c=1,734$  нм,  $c/a=1,63$ . Размер областей когерентного рассеяния (ОКР) обсуждаемой фазы составляет 25-30 нм. Вторая кристаллическая фаза  $\text{C}_{70}$ , зафиксированная в материале (в дальнейшем изложении - ГПУ<sub>2</sub>), так же имела гексагональную структуру (12 % объема кристаллической части образца). Параметры кристаллической решетки ГПУ<sub>2</sub> -  $a=1,017$  нм,  $c=1,861$  нм ( $c/a=1,83$ ).

Кристаллическая часть образца сохраненного после нагружения фуллерена  $\text{C}_{70}$  до давления 9 ГПа, включает две фазы. Одна из них имеет ГЦК - структуру с параметром решетки  $a=1,502$  нм. Вторая фаза имеет ГПУ-структуру с параметрами решетки  $a=1,062$  нм,  $c=1,732$  нм ( $c/a=1,63$ ). Содержание ГЦК-фазы составляет 60 % об., ГПУ-фазы – 40 % об. Размер ОКР у ГЦК-фазы составлял 15-20 нм, у ГПУ-фазы – около 30 нм.

В материале, сохраненном после нагружения фуллерена до давлений 14 ГПа и 19 ГПа доминирует фаза с ГЦК-структурой (85 и 89 % об., соответственно). Параметр кристаллической решетки кубического  $\text{C}_{70}$  в обоих случаях составляет  $a=1,501 \pm 0,001$  нм, размер ОКР – 13 нм (14 ГПа) и 14 нм (19 ГПа). В исследованных образцах так же присутствует фаза  $\text{C}_{70}$  с ГПУ- структурой (15 и 11 % об., соответственно).

Ранее, нами была выполнена серия экспериментов по исследованию фазовых превращений фуллерена  $\text{C}_{70}$  при ударно-волновом нагружении в диапазоне давлений до 52 ГПа [1]. В качестве исходного материала использовался фуллерен  $\text{C}_{70}$  полифазного состава (смесь ГПУ и ромбоэдрической кристаллических модификаций  $\text{C}_{70}$ ).

Сравнивая полученные в данной работе результаты с результатами [1], можно сделать заключение, что во всем исследованном диапазоне давлений результаты ударно-волнового нагружения фуллерена  $\text{C}_{70}$  с различным исходным фазовым составом качественно совпадают. Кристаллическая модификация фуллерена  $\text{C}_{70}$  с ГПУ-структурой в условиях ступенчатого ударно-волнового нагружения стабильна вплоть до давления 8 ГПа. В области давлений 9-23.5 ГПа фиксируется фазовое превращение ГПУ→ГЦК, глубина которого увеличивается по мере увеличения интенсивности нагружения: в образцах, сохраненных после ударно-волнового нагружения  $\text{C}_{70}$  до давления 23,5 ГПа, наблюдается лишь кристаллическая модификация фуллерена  $\text{C}_{70}$  с ГЦК структурой (5% об.). При дальнейшем увеличении ударного давления происходит полное разрушение молекул фуллерена  $\text{C}_{70}$  с образованием графитоподобного углерода.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 05-02-17707).

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЩНЫХ ПОТОКОВ ЭНЕРГИИ С ПОРИСТЫМИ И  
КОНДЕНСИРОВАННЫМИ МИШЕНЯМИ**

*Ефремов В.П.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва*

*efr@ihed.ras.ru*

Диоксид кремния ( $\text{SiO}_2$ ) интенсивно используется в физике высокой плотности энергии. В данной работе анализируется поведение  $\text{SiO}_2$  –материалов ( волоконных световодов [1], аэрогелей [2,3,4,5,7] и микросфер [6]) под действием импульсных потоков энергии. Необходимость в такой информации определяется потребностями аэрокосмической техники, новых типов диагностики корпускулярных частиц и средств передачи информации. Приводится анализ экспериментальных данных и методов интерпретации.

1. Е.М.Дианов, В.Е.Фортов, И.А.Буфетов, В.П.Ефремов, А.А.Фролов, М.Я.Щелев, В.И.Лозовой. Детонационно-подобный режим разрушения волоконных световодов под действием интенсивно-го лазерного излучения // Письма в ЖЭТФ. Т.83. Вып.2. 2006. С.84-88.
2. Л.А.Мержиевский, В.П.Ефремов, П.И.Зубков, Л.А.Лукьянчиков, К.А.Тен, В.М.Титов, Б.П.Толочко, В.Е.Фортов, М.Р.Шарафутдинов, М.А.Шеромов. Исследование с помощью синхро-тронного излучения динамики ударно-волнового сжатия аэрогеля // Труды международной кон-ференции «VII Харитоновские тематические научные чтения». Экстремальные состояния веще-ства. Детонация. Ударные волны. Саров. 14-18 марта 2005. С. 665-669.
3. O.Rosmej, S.A.Pikuz Jr., S.Korostiy, A.Blazevic, A.Fertman, T.Mutin, V.P.Shevelko, V.P.Efremov, T.A.Pikuz, A.Ya.Faenov, P.Loboda, A.A. Golubev, D.H.H.Hoffmann. Radiation dynamics of fast heavy ions interacting matter // Laser and Particle Beams. 2005, Vol. 23, P. 1-7.
4. V.P.Efremov, B.A.Demidov, M.V.Ivkin, A.N.Mescheryakov, V.A.Petrov, A.I.Potapenko. Investigation of plasma stream collision produced by thin films irradiated by powerful pulsed electron beam // Journal of Physics A: Mathematical and General. J. Phys. A: Math. Gen. 39. №17.2006. P.4771- 4774.
5. S.A.Pikuz, V.P.Efremov, A.Ya.Faenov, O.N.Rosmej, I.Yu.Skobelev, A.V.Shutov, D.H.H.Hoffmann. In-vestigation of heavy ions tracks energy deposition inside solid media by methods of x-ray spectroscopy // Journal of Physics A: Mathematical and General. J. Phys. A: Math. Gen. 39. №17.2006. P.4765- 4769.
6. Демидов Б.А., Ефремов В.П., Ивкин М.В. и др. Генерация предвестника импульса давления в ма-териалах, обладающих кластерной структурой. // ЖТФ. 1997. Т.67. №11. С.19-25.
7. Демидов Б.А., Ефремов В.П., Фортов В.Е. и др. Определение динамических характеристик аэро-гелей в зоне энерговыделения мощного электронного пучка. // ЖТФ. 1998, Т.68, №10. С.117.
8. Ефремов В.П., Острик А.В., Потапенко А.И, Фортов В.Е. Генерация давления при импульсном объемном энер-говыделении в гетерогенном материале, содержащем полые микросферы. // Хим. физика. 2000. Т.19. №2. С.32-43.

**РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ ИЗЛУЧЕНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД ПОД  
ВОЗДЕЙСТВИЕМ ОДИНОЧНЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ**

*Пикюз мл. С.А.<sup>\*1</sup>, Розмей О.Н.<sup>2</sup>, Ефремов В.П.<sup>1</sup>, Фертман А.Д.<sup>3</sup>, Коростий С.<sup>2</sup>, Блажевич А.<sup>2</sup>,  
Фортов В.Е.<sup>1</sup>, Хоффманн Д.Х.Х.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>GSI, Darmstadt, Germany, <sup>3</sup>ГНЦ РФ ИТЭФ, Москва, Россия

*\*pikuz@mem3.phys.msu.ru*

Исследован процесс воздействия тяжелых ионов с энергией 100 – 550 МэВ на конденсированные среды различной плотности. Представлены результаты экспериментальных исследований на линейном ускорителе UNILAS, GSI, Дармштадт, по торможению ионов Ni, Ca и Mg с исходной энергией в диапазоне от 11.4 до 4.7 МэВ/нуклон до полной остановки внутри твердотельного алюминия, кварца и кварцевых аэрогелей со средними плотностями 0.04 и 0.023 г/см<sup>3</sup>. Ток ионов составлял крайне малую величину порядка 0.1 мкА, что позволяет рассматривать весь процесс как статистику актов взаимодействия одиночных ионов с невозбужденным веществом.

Примененный диагностический метод основан на спектрально разрешенном наблюдении излучения переходов электронов на К-оболочку в многозарядных ионах облучаемой среды, с пространственным разрешением вдоль направления распространения пучка. Основными преимуществами метода являются как характерное время наблюдаемых излучательных переходов (порядка 30-50 фс), так и довольно низкий коэффициент поглощения излучения с энергией 1.5–2 кэВ в исследуемой среде, что позволяет получать информацию напрямую из области взаимодействия внутри конденсированной среды на первых десятках фемтосекунд после возбуждения.

Зарегистрировано перераспределение относительных интенсивностей групп линий, излученных ионами с различной степенью ионизации L-оболочки по мере торможения пучка ионов в веществе. Построены зависимости содержания различных зарядовых состояний вблизи оси трека тяжелого иона от его скорости и величины удельного энерговклада. Определены величины сдвигов положения групп сателлитов по спектру в длинноволновую сторону относительно табличных значений для длин волн наиболее вероятных переходов в изолированном атоме. С использованием реперных линий в спектре, с высокой точностью построена зависимость величины сдвига от зарядового состояния излучающих ионов.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ВЗАИМОДЕЙСТВИЮ ПУЧКОВ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ С ФОЛЬГАМИ-МИШЕНЯМИ

*Шутов А.В.\*, Григорьев Д.А.*

*ИПХФ РАН, Черноголовка*

*\*shutov@fcr.ac.ru*

Использованная в последнее время в экспериментах GSI новая диагностика ионного пучка показала, что пучок фокусируется до значительно меньшего размера, чем считалось ранее. В настоящей работе 2D кодом BIG2 [1] с использованием широкодиапазонных УРС [2] и данных по тормозной способности ионов из кода SRIM [3] в двумерной и одномерной постановке проведено численное моделирование выполненных экспериментов [4,5] по нагреву и разлету фольг-мишеней под действием пучка. На основании численного моделирования, а также модели переноса излучения, рассчитаны профили температуры поверхности мишени, давления и скорости от времени, с учетом пространственного разрешения экспериментальной диагностики.

Новые данные по фокусировке пучка позволили описать результаты новых экспериментов, и устранить несоответствие между экспериментальными и расчетными профилями для экспериментов проведенных ранее.

Работа выполнена при поддержке проектов: РФФИ 06-02-04011-ННИО\_а «Исследование уравнений состояния и проводимости веществ при высоких плотностях энергии»; программ президиума РАН «Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий», «Параллельные вычисления и многопроцессорные вычислительные системы», «Математическое моделирование».

1. V.E.Fortov, B.Goel, C-D.Munz, A.L.Ni, A.V.Shutov, O.Yu.Vorobiev, Numerical Simulations of Nonstationary Fronts by Godunov Method in Moving Grids // Nuclear Science and Engineering. 123,169-189 (1996)
2. А.В.Бушман, И.В.Ломоносов, В.Е.Фортов, Уравнения состояния металлов при высоких плотностях энергии. Черноголовка,1992
3. "The Stopping and Range of Ions in Solids", by J. F. Ziegler, J. P. Biersack and U. Littmark, Pergamon Press, New York, 1985
4. V.Ya. Ternovoi, V.E. Fortov, V.K. Gryaznov, V. Kim, M. Kulish, I.V. Lomonosov, V. Mintsev, D. Nikolaev, N. Shilkin, A. Shutov, D. Fernengel, D.H.H. Hoffmann, A. Hug, J. Menzel, P. Ni, S. Udreă, D. Varentsov, P. Spiller, N.A. Tahir, H. Wahl, A. Fertman, A. Golubev, B. Sharkov, V. Turtikov Expansion of evaporating lead after ion-beam and shock-wave loading // GSI Annual Report 2005 (GSI Report 2006-2)
5. Николаев Д.Н., Варенцов Д.В., Кулиш М.И., Терновой В.Я., Udreă S., Hug A., Шилкин Н.С., Голубев А.А., Грязнов В.К., Ломоносов И.В., Минцев В.Б., Tahir N.A., Туртиков В.И., Фертман А.Д., Фортов В.Е., Hoffman Д.Н., Шарков Б.Ю., Шутов А.В., Ni P.A. Экспериментальные исследования состояний вещества с высокой плотностью энергии, генерируемых пучком тяжелых ионов // тезисы XXI Международной Конференции «Уравнения Состояния Вещества» Эльбрус-2006 с.115

## ВОЗБУЖДЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН КОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ НА ГРАНИЦЕ ПЛАЗМЫ

*Фролов А.А.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва*

*frolov@ihed.ras.ru*

При пересечении равномерно и прямолинейно движущейся заряженной частицей границы раздела двух материальных сред с различными диэлектрическими проницаемостями происходит излучение электромагнитных волн. Это явление было теоретически предсказано в работе [1] (см. также [2]) и получило название переходного излучения. При этом происходит переходное излучение, как объемных электромагнитных волн, так и поверхностных волн, распространяющихся вдоль границы раздела двух сред.

В настоящей работе исследовано переходное излучение поверхностных волн при взаимодействии короткого лазерного импульса с полуграниченной плазмой. Генерация поверхностных волн обусловлена тем вихревым электрическим током, который возбуждается на границе плазмы из-за поперечного воздействия лазерного импульса. Исследовано пространственно-временное распределение электромагнитного поля поверхностной волны. Показано, что поверхностная волна распространяется вдоль границы плазмы в виде импульса электромагнитного поля, частота и временная длительность которого зависят от размера фокального пятна лазерного излучения. При увеличении размера фокального пятна понижается частота поверхностной волны, а также заметно уменьшается временная длительность излучения. Поэтому для широкого лазерного импульса поверхностная волна имеет всего несколько циклов колебаний. Исследованы спектральные и энергетические характеристики поверхностных волн, распространяющихся из области взаимодействия лазерного импульса с границей плазмы. Показано, что остророфокусированный короткий лазерный импульс излучает коротковолновые поверхностные колебания с частотой близкой к  $\omega_p/\sqrt{2}$ , где  $\omega_p$  - плазменная частота. При увеличении пространственных масштабов лазерного импульса частота поверхностных волн уменьшается и снижается энергия излучения. Вычислена полная энергия поверхностных волн и проанализирована ее зависимость от длительности и размера фокального пятна лазерного импульса. Проведено сравнение величины энергии поверхностных волн с энергией переходного излучения электромагнитных волн в вакуум. Показано, что остророфокусированный лазерный импульс значительную часть передаваемой энергии расходует на возбуждение поверхностных волн и лишь малая доля ее идет на генерацию переходного излучения в вакуум. Увеличение размера фокального пятна лазерного импульса приводит к перераспределению энергии и увеличению доли объемного переходного излучения. В результате этого широкий лазерный импульс большую долю теряемой энергии расходует на переходное излучение в вакуум, и лишь незначительная ее часть идет в поверхностные волны.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 04-02-17055) и программ Президиума РАН №№ 2,16,18.

1. Гинзбург В.Л., Франк И.М. // ЖЭТФ. 1946. Т. 16. С. 15.

**УСКОРЕНИЕ НЕМОНОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОННЫХ СГУСТКОВ В НЕЛИНЕЙНОЙ  
КИЛЬВАТЕРНОЙ ВОЛНЕ**

*Кузнецов С.В.\* , Андреев Н.Е.*

*IHED RAS, Moscow, Russia*

*\*ksv@ihed.ras.ru*

Проведено аналитическое исследование в одномерной постановке и трехмерное численное моделирование процесса захвата и ускорения в нелинейной кильватерной волне, возбуждаемой лазерным импульсом, коротких немонэнергетических электронных сгустков, а также электронов из немонэнергетических пучков различных начальных размеров. Целью исследования является использование особенностей характеристик нелинейной кильватерной волны для реализации возможно более монэнергетического процесса ускорения электронов. Найдены условия и необходимые параметры процесса ускорения в кильватерном поле немонэнергетического сгустка конечной длины, при которых электроны сгустка достигают больших значений энергии, а разброс по энергии между ними минимизируется вследствие влияния нелинейной структуры ускоряющего поля. Обнаруженный эффект энергетической группировки электронов на определенной длине ускорения применен к ускорению сгустков электронов, захватываемых кильватерным полем из инжектируемых в него электронных пучков произвольных размеров. Показана возможность получения за счет этого эффекта высокоэнергичных компактных малоэммиттансных сгустков ускоренных электронов. Результаты аналитического исследования и численного моделирования находятся в хорошем согласии.

Работа выполнена при частичной поддержке Российским фондом фундаментальных исследований, грант РФФИ № №04-02-17055, и Программами Президиума РАН «Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий» и «Фемтосекундная оптика и физика сверхсильных лазерных полей».

**ФЕМТОСЕКУНДНАЯ АБЛЯЦИЯ ЗОЛОТА: ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ**

*Иногамов Н.А.<sup>\*1</sup>, Агранат М.Б.<sup>2</sup>, Анисимов С.И.<sup>1</sup>, Ашитков С.И.<sup>2</sup>, Жаховский В.В.<sup>2</sup>, Ломоносов И.В.<sup>2</sup>, Нишихара К.<sup>3</sup>, Овчинников А.В.<sup>2</sup>, Петров Ю.В.<sup>1</sup>, Фортвов В.Е.<sup>2</sup>, Хищенко К.В.<sup>2</sup>, Хозлов В.А.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ИТФ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>ИТЭС ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>3</sup>ILE, Osaka, Japan

<sup>\*</sup>nail-inogamov@yandex.ru

Важными являются исследования уравнений состояния (УРС), прочностных характеристик ("физика отрицательных давлений") и кинетических свойств веществ, например, коэффициента теплопроводности  $\kappa$  и коэффициента электрон-фононной и электрон-ионной тепловой релаксации  $\alpha$ . Речь идет об области температур  $\sim 10$  кК и плотностей порядка твердотельной (в которой названные характеристики известны только по порядку величины) и о применении ультракоротких лазерных импульсов (УКЛИ) для указанных исследований. Физика взаимодействия УКЛИ с веществом образовала отдельную перспективную быстро расширяющуюся отрасль современной науки. УКЛИ задается своей длительностью  $\tau_L$  и флуенсом  $F = \int_{-\infty}^{\infty} I dt$ , здесь  $\tau_L = 10 \div 100$  фс,  $F = 0.1 \div 1$  Дж/см<sup>2</sup>,  $I \sim 10^{13}$  Вт/см<sup>2</sup>. Имеются, во-первых, релятивистский диапазон  $I > 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup> (рекорд на сегодня  $I \sim 10^{21}$  Вт/см<sup>2</sup> достигнут на петаваттных лазерах) и, во-вторых, рассматриваемый в работе диапазон  $I \sim 10^{13}$  Вт/см<sup>2</sup> внутренних полей  $\sim \Delta/(ea)$ , к которому относятся технологические приложения;  $\Delta \sim 1$  эВ – ширина запрещенной зоны в узкозонных полупроводниках,  $a$  – межатомное расстояние. При таких интенсивностях вероятности фотозаброса в зону проводимости полупроводников велики и «металлизация» полупроводника происходит за время меньшее длительности  $\tau_L$ . В результате основная часть энергии УКЛИ  $F_{abs}$  поглощается в тонком скин-слое возле границы с вакуумом (обстоятельство 1). Важно, что рассматриваемые полупроводники имеют металлическую жидкую фазу (обстоятельство 2). В металлах и полупроводниках при превышении порога абляции расширение нагретого приповерхностного слоя мишени идет с образованием купола или оболочки из вещества в конденсированном состоянии (нанооткол). Интерференция диагностического луча, отраженного от купола и дна кратера, является причиной появления колец Ньютона. Таких колец нет в случае диэлектриков. Видимо, сочетание обстоятельств 1 и 2 делает ситуацию с полупроводниками эквивалентной металлам, а отсутствие обстоятельства 2 у диэлектриков отличает их от металлов и полупроводников. При «металлизации» диэлектриков за время действия УКЛИ имеет место переход в газообразное состояние, в котором отсутствует когезия между молекулами. Соответственно первая порция расширяющегося нагретого диэлектрика не имеет ни купола, ни двухфазной области. Применение УКЛИ позволяет проводить исследования УРС и прочности на минимальных толщинах, близких к атомарному пределу. Благодаря вариации  $F$  просматривается широкая область фазовой диаграммы. Имеются пороги плавления  $F_m$ , абляции  $F_a$  и испарения  $F_e$ . Кратер образуется при превышении  $F_a$ , а разлетающийся купол существует в пределах  $F_a < F < F_e$ . Критическая точка достигается при  $F_{cr} > F_e$ . С рипр-робе техникой УКЛИ связаны методики измерения амплитуды (кольца Ньютона) и фазы (микроринтерферометрия) отраженного робе импульса. Задача состоит в постановке с помощью колец Ньютона и микроринтерферометрии измерений параметров УРС и прочности на наномасштабах эквивалентных измерениям с помощью VISAR на больших по масштабу генераторах (ВВ, пучки, лазеры с большим  $\tau_L$ ). Большой интерес представляют также измерения в малой окрестности порога  $F_a$  для металлов и полупроводников, где из молекулярно-динамического моделирования следуют выводы о существовании пен с малым, но конечным сопротивлением растяжению, из-за чего сильно замедляется расширение в малой окрестности порога. Комбинируя микроринтерферометрию и кольца Ньютона можно определить зависимость  $v_{vac}(t)$  скорости границы, из которой следуют сведения об УРС при  $p > 0$  и прочности при  $p < 0$ . В докладе представлены недавно полученные экспериментальные данные об  $v_{vac}(t)$  для Au. Важно, что для Au экспериментально измерен коэффициент отражения. Тогда в расчетах можно оперировать не с  $F$ , а с поглощенной энергией  $F_{abs}$ . Случай Au особенно интересен, поскольку коэффициент  $\alpha$  мал и тепловая стадия перекрывается с гидродинамической. Работа поддержана грантом РФФИ 04-02-16972.

**О ПРОЦЕССАХ ПОГЛОЩЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ, ГЕНЕРАЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНОЙ ПЛАЗМЫ И ПЛАВЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ**

*Ашитков С.И.<sup>\*</sup>, Овчинников А.В., Ситников Д.С., Агранат М.Б.*

ИТЭС ОИВТ РАН, Москва

<sup>\*</sup>asi@iht.mpei.ac.ru

Поглощение мощных фемтосекундных импульсов происходит в очень тонком поверхностном слое полупроводника, приводя к образованию электронно-дырочной плазмы высокой концентрации  $10^{22}$  см<sup>-3</sup>. При этом заполнение зоны проводимости электронами носит лавинный характер. Этим объясняется малое отличие величин порогов плавления и абляции в Si и GaAs, измеренных при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов видимого и инфракрасного диапазона спектра излучения [1]. Передача энергии решетке приводит к ее нагреву и плавлению за времена порядка нескольких пикосекунд.

В настоящей работе приводятся результаты исследования характеристик электронно-дырочной плазмы и динамики плавления кристаллического Si под действием лазерных импульсов длительностью 100 фс. Применяемая интерферометрическая методика позволяла регистрировать с пространственным и временным разрешением изменения амплитуды и фазы отраженной волны и следить за изменениями комплексного показателя преломления зондируемого слоя в области нагрева до начала его расширения.

Анализ результатов экспериментов с использованием модели Друде показали, что при падающей плотности энергии  $0.2$  Дж/см<sup>2</sup>, соответствующей порогу плавления Si, в поверхностном слое  $10^{-4}$  см создается электронно-дырочная плазма с концентрацией  $9 \cdot 10^{21}$  см<sup>-3</sup> и частотой столкновений  $10^{15}$  с<sup>-1</sup>. Измеренное значение комплексного показателя преломления  $n$  спустя несколько пикосекунд после воздействия составляет величину  $n = 2.5-4.6i$

и согласуется со значением  $n$  для жидкого кремния [2] (для кристаллического Si на используемой длине волны 620 нм величина показателя преломления составляет  $n = 3.9 - 0.022i$  [3]). Время образования жидкой фазы при превышении порога плавления  $F/F_m \approx 1.05$  составляет примерно 8 пс, уменьшаясь до 1 пс при  $F/F_m \approx 1.2$ . Проводится сравнение полученных результатов с моделью плавления посредством гомогенной нуклеации [4].

1. Агранат М.Б., Анисимов С.И., Ашитков С.И. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т.83. №11. С.592.
2. Sokolowsky-Tinten K., Von der Linde D. // Phys. Rev. 2000. V.61. P.2643.
3. Palik E.D. Handbook of Optical Constants of Solids II (Academic Press. San Diego). 1991.
4. Ретфельд Б., Анисимов С.И., Ашитков С.И., Агранат М.Б. и др. // Оптический журнал. 2004. Т. 71. № 6. С. 18.

## ИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКАЯ МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ С ВЕЩЕСТВОМ

*Ситников Д.С.\* , Агранат М.Б., Ашитков С.И., Овчинников А.В.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва*

*\*rjr@iht.mpei.ac.ru*

При воздействии интенсивных лазерных импульсов с твердым телом происходит ряд быстротекущих процессов, таких как сверхбыстрое плавление, абляция поверхностного слоя мишени, диэлектрический пробой, образование плазмы и другие интересные явления. В основе диагностики этих процессов могут лежать оптические методы, поскольку последние сопровождаются изменением оптических свойств материала [1]. Оптическая интерферометрия с пространственным и временным разрешением даёт возможность детального изучения этих лазерно-индуцированных явлений. Одним из важнейших параметров материала является диэлектрическая проницаемость. Данная методика позволяет измерять ее величину при малых временных задержках (от 100 фс) относительно возбуждающего импульса до начала гидродинамического разлета.

В настоящей работе представлены результаты исследования изменений оптических констант Au под действием фемтосекундных лазерных импульсов с интенсивностью  $5 \cdot 10^{13} \div 1.4 \cdot 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup> методом интерферометрии с временным разрешением [2].

Источником излучения являлась фемтосекундная лазерная система с активной средой хром-форстерит, генерирующая импульсы длительностью 100 фс с энергией до 90 мДж на длине волны 1240 нм [3]. Контраст импульсов по интенсивности составлял не менее  $10^4$  за 1 пс до максимума импульса и более  $10^6$  за 2 пс и в наносекундном диапазоне.

Исследование лазерно-индуцированных изменений мишени проводилось методом "pump-probe". В качестве образца использовалась полированная стеклянная подложка с напыленным слоем Au толщиной более 4 мкм. Нагрев поверхности мишени осуществлялся сфокусированным мощным импульсом накачки на длине волны 1240 нм с гауссовым пространственным распределением в фокусе. Регистрация интерферограмм осуществлялась ПЗС камерой, расположенной в плоскости изображения объектива микроинтерферометра Линника, подсвечиваемого задержанным по времени зондирующим импульсом на длине волны 620 нм. Методика позволяла регистрировать изменения амплитуды коэффициента отражения и фазы отраженной волны до нескольких микрометров с временным разрешением 100 фс и разрешением по пространству до 3 мкм.

В работе приводятся результаты исследования изменения комплексного показателя преломления и динамики разлета поверхностного слоя мишени под действием фемтосекундных импульсов с пиковой интенсивностью  $10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup>.

1. Wang X. Y., Downer M.C. Opt. Lett. 1992 V.17, P.1450.
2. Temnov V.V., Sokolowsky-Tinten K., Zhou P., Von der Linde D. // Appl. Phys. A. 2004. V. 78. P. 483.
3. Агранат М.Б., Ашитков С.И., Иванов А.А. и др. // Квант. электроника. 2004. V. 34. P. 506.

**УСЛОВИЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ СКОЛЬЗЯЩЕГО РАЗРЯДА И ОЦЕНКА СОЗДАВАЕМЫХ  
ИМ УСИЛИЙ В ДОЗВУКОВОМ И СВЕРХЗВУКОВОМ ПОТОКЕ ВОЗДУХА**

*Аксёнов В.С.<sup>1</sup>, Губин С.А.<sup>1</sup>, Голуб В.В.<sup>2</sup>, Ефремов К.В.\*<sup>1</sup>*

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

\*dm2k@yandex.ru

Плазма разряда, инициируемая вдоль полупроводящей поверхности крыла или корпуса в качестве средства управления летательным аппаратом (ЛА) находится в фокусе современных авиационных исследований. Образование мощной ударной волны при пробое воздушного промежутка скользящим разрядом изменяет обтекание поверхности ЛА и создает импульс для изменения траектории полета. Измерения критических условий существования скользящего разряда в потоке воздуха важны для его использования в сверхзвуковых ЛА. Эти условия для инициирования одиночного скользящего разряда в сверхзвуковом потоке воздуха ранее исследовались в аэродинамической трубе.

Скользкий разряд на крыле исследовался в частотном режиме в потоке воздуха, который создавался вентиляционной установкой или истечением воздуха в вакуумированную ёмкость. Разряд представлял пробой между электродами и поверхностью полупроводящего стержня из углеграфита, расположенного по нормали к потоку «заподлицо» с поверхностью обтекаемых тел - клина с углом 10 град. или модели крыла. Пробиваемый промежуток между электродами составлял 4 см - 8 см, текущее напряжение между электродами регистрировалось, и разряд снимался кинокамерой. До скорости воздуха 40 м/с разряд был такой же, как в неподвижной атмосфере. В трубе Эйфеля, которая создавала воздушный поток, использовали два режима: давление в сопле 0.16 атм и скорость потока - 520 м/с и давление - 0.24 атм и скорость - 200 м/с.

Обнаружено, что основные факторы, определяющие устойчивость разряда - это напряженность поля на разряднике, величина сегментов разрядника, разогрев электродов и давление воздуха (электрическая прочность воздуха зависит от давления). Увеличение скорости потока приводит к уменьшению температуры воздуха и к уменьшению давления (плотности). (Это следует из свойства инвариантности полного давления потока.)

Показана возможность устойчивого возбуждения скользящего разряда в трубе Эйфеля при скоростях потока воздуха 200 м/с - 520 м/с и напряженности электрического поля 0.5 - 1.0 кВ/см. Энергии разрядов с частотой до 40 Гц составляли 8 - 40 Дж при подводимой мощности от 100 Вт до 500 Вт.

Была проведена количественная оценка импульса, с которой разряд различной энергии действует на модельное крыло в потоке воздуха и в покоящейся атмосфере при нормальных условиях. Во время измерений крыло крепились на аэродинамических весах. Измерительный комплекс был откалиброван серией неупругих ударов сферических тел от 2 до 10 грамм массы, свободно падающих с высоты 1.0 м. При импульсном воздействии на весы возникают затухающие колебания, амплитуда которых принималась пропорциональной действующему импульсу. Крыло располагалось горизонтально с нулевым углом атаки в потоке со скоростью 40 м/с, а также в покоящейся атмосфере. Испытания проводились с различными профилями крыла и энергиями разряда.

Для модели с размерами плоскости 8 см на 12 см с разрядным промежутком 4 см, с номинальной энергией накопителя разрядника 154 Дж в потоке 40 м/с был получен импульс отдачи с эффективностью  $0.8 \cdot 10^{-4}$  Н\*с/Дж, без потока  $0.65 \cdot 10^{-4}$  Н\*с/Дж.

Таким образом, экспериментально измерено усилие, возникающее при инициировании электрического разряда на поверхности, обтекаемой потоком воздуха.

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ИНИЦИАЦИИ РАЗРЯДА В ПОСТОЯННОМ  
ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ С ПОМОЩЬЮ ПЛАЗМЕННОГО КАНАЛА, СОЗДАВАЕМОГО  
МОЩНЫМ ФЕМТОСЕКУНДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ**

*Александров Н.Л.<sup>1</sup>, Базелян Э.М.<sup>2</sup>, Богатов Н.А.\*<sup>3</sup>, Степанов А.В.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>МФТИ, Долгопрудный, <sup>2</sup>ЭНИИ, Москва, <sup>3</sup>ИПФ РАН, Нижний Новгород

\*bogatov@appl.sci-nnov.ru

В докладе сообщается о результатах экспериментального исследования инициации разряда в постоянном электрическом поле с помощью плазменной филаменты, создаваемой в воздухе мощным фемтосекундным лазерным излучением

Постоянное напряжение ( $U \leq 15$  kV) подавалось на плоские дисковые электроды. Расстояние между электродами изменялось в диапазоне 2 - 9 мм. Лазерные импульсы ( $W \leq 20$  мДж,  $F = 10$  Гц,  $\tau = 60 \div 70$  фс,  $\lambda = 0.8$  мкм) генерировались Ti:Sa лазерной системой и фокусировались сферическим зеркалом с фокусным расстоянием 86 см. В газоразрядный промежуток лазерное излучение вводилось перпендикулярно плоскостям электродов через отверстия в центрах электродов диаметром 3 мм.

В отсутствие филаменты разряд между электродами зажигался при напряжении, соответствующем кривой Пашена для воздуха, а положение искры в плоскости электродов было случайным. Генерация филаменты приводила к жесткой фиксации положения искры, совпадающего с положением лазерного луча, и к снижению пробойного напряжения. Иницированный лазерной филаментой пробой наступал спустя некоторое время после лазерного импульса (время задержки разряда), которое зависело от параметров лазерного импульса и особенно от напряжения на электродах. В докладе представлены результаты измерения зависимости пробойного напряжения и времени задержки иницированного разряда от энергии лазерного импульса, напряжения на электродах и междуэлектродного расстояния. Измерены также зависимости амплитуды акустической волны, генерируемой филаментой в атмосфере, и тока в филаменте от напряжения на электродах в допробойном режиме

Выполнено численное моделирование развития разряда в воздушном промежутке при организации в нем тонкого ионизированного канала. Результаты расчета согласуются с экспериментальными данными.

Сделан вывод о решающей роли нагрева газа в плазменном канале, и последующем разрежении газа вследствие расширения канала, в инициации пробоя газоразрядного промежутка. Нагрев газа происходит в результате

протекания тока в распадающейся плазме филаменты под действием постоянного поля.

## ОГРАНИЧЕНИЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ СВЯЗАННЫХ ПАР В НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ

*Ланкин А.В.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва*

*lankin@ihed.ras.ru*

Работа посвящена изучению особенностей распределения по энергии связанных состояний в двухкомпонентной невырожденной неидеальной плазме в зависимости от степени её неидеальности в диапазоне  $\gamma = (4\pi n_e/3)^{1/3} e^2/(kT) = 0.1 - 4$  [1]. Результаты получены на основании метода молекулярно-динамического моделирования в псевдопотенциальной модели [2]. Выделения связанных состояний основано на анализе МД траектории движения частиц. Для каждого электрона производился расчет набега фазы вращения относительно его ближайшего иона:  $d\phi = L_{ei}/(\mu r_{ei})dt$ , где  $L_{ei}$  — момент импульса пары,  $r_{ei}$  — расстояние между электроном и ионом,  $\mu$  — приведенная масса. Связанными считаются частицы, для которых  $\phi$  успевает достичь критического значения  $\phi_0$  до того, как электрон перейдет к другому иону.

В результате расчетов были получены структуры энергетических спектров связанных состояний а также их статистическая сумма при различных значениях параметра неидеальности, глубины потенциала электрон-ионного взаимодействия  $U_{min} = -(3 - 7)kT$  и других параметров. В расчетах использовались различные критерии  $\phi_0 = 2\pi - 8\pi$ .

Были построены энергетические спектры при различных параметрах неидеальности плазмы. Установлено, что в области же больших энергий связи он практически совпадает с распределением электронов в кулоновском поле. В тоже время их структура в сильно неидеальной плазме при малых энергиях связи не совпадает ни со структурой спектра в Дебаевском поле, ни с аппроксимацией основанной на статистической сумме Планка-Ларкина. Установлено, что спектр ограничен в области малых энергий связи конечным, отличным от нуля значением энергии связи. Установлено, что это ограничение обусловлено конечным значением среднего расстояния между соседними ионами. В силу этого при увеличении степени неидеальности плазмы отношение статистической суммы связанных пар к статистической сумме Планка-Ларкина монотонно уменьшается. Этот фактор объясняет структуру зависимости доли связанных пар от степени неидеальности плазмы, которая имеет куполообразную зависимость, проходя через максимум при степени неидеальности плазмы меньшей единицы. То есть последнюю удаётся качественно воспроизвести, взяв приближение [3] и используя полученные в моделировании значения статистических сумм пар.

1. Морозов И.В., Норман Г.Э. // ЖЭТФ. 4124302. 4302. 2005
2. Ланкин А.В., Морозов И.В. // Труды научной конференции МФТИ, ноябрь 2005 г
3. А.Л. Хомкин, И.А. Муленко //ТВТ. 41. 3. Р. 327-333. 2003

## ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ЯЧЕЕЧНОЙ МОДЕЛИ ТОМАСА-ФЕРМИ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ДВУХТЕМПЕРАТУРНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ПЛАЗМЫ

*Обручкова Л.Р.\*, Анфельбаум Е.М., Левашов П.Р., Хищенко К.В.*

*ИТЭС ОИВТ РАН, Москва*

*\*o\_liliya@ihed.ras.ru*

Существует большое количество задач, в которых необходимо учитывать различие температур электронов и ионов, в частности, взаимодействие лазерного излучения или пучков заряженных частиц с веществом, электрический взрыв проволок. В связи с этим возникает необходимость в простой и универсальной модели уравнения состояния, использующей минимум информации об индивидуальных свойствах вещества и одновременно реалистично описывающей его термодинамику. Хорошо известным примером такой модели является ячеечная модель Томаса-Ферми для  $T \neq 0$ , впервые сформулированная в [1].

В обобщенной модели Томаса-Ферми при заданной температуре и плотности вещества распределение заряда в атомной ячейке непрерывно. Нелинейное уравнение Пуассона, связывающее самосогласованный потенциал  $V(r)$  с электронной плотностью, решается численно итерационным методом. Ячеечная модель Томаса-Ферми позволяет самосогласованно при заданной температуре и плотности определить среднюю степень ионизации вещества, потенциал ионизации, а также различные термодинамические функции [2, 3]. В работе, в частности, будет продемонстрирован метод расчета скорости звука и других величин, выражающихся через вторые производные термодинамического потенциала, которые необходимы при использовании современных схем интегрирования уравнений газовой динамики.

Известные недостатки модели Томаса-Ферми при использовании ее для построения двухтемпературного уравнения состояния могут быть скомпенсированы выражением для теплового вклада ядер.

Работа поддержана грантами РФФИ № 06-02-17464 и Президента РФ НШ-3683.2006.2.

1. Feynman R., Metropolis N., Teller E. Equations of state of elements based on the generalized Fermi-Thomas theory // Phys.Rev. 1949. V. 75. № 10. P.1561-1573.
2. Никифоров А. Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. М.: Физматлит, 2000.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. М: Физматлит, 2001.

## ИНДЕКС ПО АВТОРАМ

- Агранат М.Б., 23, 24  
Аксёнов В.С., 25  
Александров Н.Л., 25  
Алымов М.И., 8  
Андреев Н.Е., 22  
Анисимов С.И., 23  
Апфельбаум Е.М., 26  
Ашитков С.И., 23, 24  
Башарин А.Ю., 11  
Базелян Э.М., 25  
Беспалов Е.В., 12  
Блажевич А., 20  
Богатов Н.А., 25  
Богданова Ю.А., 16  
Болеста А.В., 17  
Бородина Т.И., 19  
Черевко А.Г., 13  
Дорофеев Г.Л., 12  
Дремин А.Н., 16  
Дюльдина Э.В., 11  
Ефремов К.В., 25  
Ефремов В.П., 12, 19, 20  
Фертман А.Д., 20  
Фортгов В.Е., 12, 19, 20, 23  
Фролов А.А., 21  
Гельчинский Б.Р., 11  
Гольшев А.А., 9  
Голуб В.В., 25  
Григорьев Д.А., 21  
Губин С.А., 16, 25  
Хищенко К.В., 18, 23, 26  
Хоффманн Д.Х.Х., 20  
Хохлов В.А., 23  
Иногамов Н.А., 23  
Иванова А.Н., 18  
Канель Г.И., 5  
Каркач С.П., 16, 18  
Карпенко С.В., 8, 14  
Карташов А.М., 17  
Коростий С., 20  
Костенко С.С., 18  
Красноперов Е.П., 12  
Кучеренко М.Г., 10  
Куксин А.Ю., 10  
Куроедов Ю.Д., 12  
Кузнецов С.В., 22  
Ланкин А.В., 26  
Левашов П.Р., 26  
Ломоносов И.В., 23  
Мамчур М.О., 8  
Милявский В.В., 19  
Мирзоев А.А., 11  
Мочалова В.М., 17  
Молодец А.М., 9  
Морозов И.В., 5  
Нишихара К., 23  
Норман Г.Э., 5  
Обручкова Л.Р., 26  
Овчинников А.В., 23, 24  
Петров Ю.В., 23  
Пикуз м.л. С.А., 20  
Разоренов С.В., 5  
Розмей О.Н., 20  
Савинцев А.П., 14  
Ситников Д.С., 23, 24  
Скобелев И.Ю., 5  
Скробков О.В., 16, 18  
Смирнов А.Л., 16, 18  
Соколов С.Н., 19  
Сосиков В.А., 12  
Стегайлов В.В., 10  
Степанов А.В., 25  
Шутов А.В., 21  
Томпсон Д.Л., 17  
Торунов С.И., 19  
Турчанинов М.А., 11  
Уткин А.В., 7, 12, 17, 19  
Викторов С.Б., 16  
Вяткин В.С., 12  
Якушев В.В., 7  
Янилкин А.В., 7, 10  
Зубков П.И., 17  
Зубов В.И., 11  
Жаховский В.В., 23  
Жерноклетов Д.М., 19  
Жуков А.Н., 7  
Жук А.З., 19  
Bergner F., 6  
Fortov V.E., 18  
Gokhman A., 6  
Khishchenko K.V., 18  
Milyavskiy V.V., 18  
Ulbricht A., 6  
Utkin A.V., 18  
Yakushev V.V., 18  
Zhuk A.Z., 18

## ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

*FZR* — Forschungszentrum Rossendorf  
*GSI* — Gesellschaft für Schwerionenforschung mbH  
*ILE* — Institute of Laser Engineering  
*IHEP RAS* — Institute for High Energy Densities of Russian Academy of Sciences  
*SUPU* — South Ukrainian Pedagogical University  
*UMC* — University of Missouri-Columbia  
*ВНИИФТРИ* — Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений  
*ГНЦ РФ ИТЭФ* — Государственный научный центр РФ Институт теоретической и экспериментальной физики  
*ИГиЛ СО РАН* — Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН  
*ИМЕТ РАН* — Институт металлургии и материаловедения РАН  
*ИМЕТ УрО РАН* — Институт металлургии УрО РАН  
*ИПФ РАН* — Институт прикладной физики РАН  
*ИПХФ РАН* — Институт проблем химической физики РАН  
*ИТПМ СО РАН* — Институт теоретической и прикладной механики СО РАН  
*ИТФ РАН* — Институт теоретической физики РАН  
*ИТЭС ОИВТ РАН* — Институт теплофизики экстремальных состояний Объединенного института высоких температур РАН  
*КБГУ* — Кабардино-Балкарский государственный университет  
*МГТУ им. Г. И. Носова* — Магнитогорский государственный технический университет  
*МИФИ* — Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет)  
*МФТИ* — Московский физико-технический институт  
*НГУ* — Новосибирский государственный университет  
*НИИ ПМА КБНЦ РАН* — Научно-исследовательский институт прикладной математики и автоматизации Кабардино-Балкарского научного центра РАН  
*ОГУ* — Оренбургский государственный университет  
*РНЦ КИ* — Российский научный центр «Курчатовский институт»  
*РУДН* — Российский университет дружбы народов  
*СибГУТИ* — Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики  
*ЭНИИ* — Научно-исследовательский институт им. Г. М. Кржижановского  
*ЮУрГУ* — Южно-уральский государственный университет

## ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. *Gokhman Aleksandr Raphailovich*, Организация не зарегистрирована, 65020, Odessa, Staroportofrankovskaya, 26, тел.: +10(048)7321010, факс: +10(048)7325103, gokhman@paso.net
2. *Альмов Михаил Иванович*, Организация не зарегистрирована, 119991, Москва, Ленинский проспект, д.49, тел.: +7(495)1358641, факс: +7(495)1358641, alymov@imet.ac.ru
3. *Анисимов Сергей Иванович*, ИТФ РАН, 107207, Москва, Байкальская, д. 38, корп. 3, кв. 10, тел.: 7(496)5248740, факс: 7(495)7029317, anisimov@itp.ac.ru
4. *Ашитков Сергей Игоревич*, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)3627788, факс: +7(495)3625136, asi@iht.mpei.ac.ru
5. *Башарин Андрей Юрьевич*, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: 7(495)3625603, факс: 7(495)3625603, ayb@iht.mpei.ac.ru
6. *Беспалов Евгений Викторович*, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4832295, факс: +7(495)4857990, bev@ihed.ras.ru
7. *Богатов Николай Анатольевич*, ИПФ РАН, 603950, Нижний Новгород, ул. Ульянова, д.46, тел.: +7(8312)160649, факс: +7(8312)160649, bogatov@appl.sci-nnov.ru
8. *Болеста Алексей Владимирович*, Организация не зарегистрирована, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, тел.: +7(383)3303804, факс: +7(383)3307268, bolesta@itam.nsc.ru
9. *Гельчинский Борис Рафаилович*, Организация не зарегистрирована, 620086, Екатеринбург, ул. Пальмиро Тольятти, 15д квя 49, тел.: +7(343)2439241, факс: +7(343)2679182, brg47@list.ru
10. *Гольшев Андрей Анатольевич*, ИПХФ РАН, 142432, Московская область, Черноголовка, пр. Ак. Семенова, д.1, тел.: +7(496-52)21049, факс: +7(496-52)21049, golyshhev@icp.ac.ru
11. *Губин Сергей Александрович*, МИФИ, 115409, Москва, Каширское ш., д.31, тел.: +7(495)3239035, факс: нет, gubin@interphysica.ru
12. *Дюльдина Эльвира Владимировна*, Организация не зарегистрирована, 455000, Челябинская область, г. Магнитогорск, пр. Ленина, 52/1 кв.8, тел.: +7(3519)279636, факс: +7(3519)298426, dev@magtu.ru
13. *Ефремов Владимир Петрович*, ИТЭС ОИВТ РАН, 12541, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4850963, факс: +7(495)4857990, efr@ihed.ras.ru
14. *Ефремов Кирилл Владимирович*, МИФИ, 115409, Москва, Каширское ш. д.31, тел.: +79163223865, факс: +79163223865, dm2k@yandex.ru
15. *Зубков Павел Иванович*, ИГиЛ СО РАН, 630090, Новосибирск, Полевая 16, 34, тел.: +7(383)3331911, факс: +7(383)3331612, zubk@hydro.nsc.ru
16. *Зубов Вячеслав Иванович*, Организация не зарегистрирована, 115569, Москва, ул. Марш. Захарова, д. 23 кв. 60, тел.: 7(495)3936630, факс: 7(495)3936630, v.zubov@yahoo.com.br
17. *Иногамов Nailь Алимович*, ИТФ РАН, 117588, Москва, ул. Тарусская, д. 4, кв. 230, тел.: +7(495)4258767, факс: +7(495)7029317, nail-inogamov@yandex.ru

18. Канель Геннадий Исаакович, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13/19, тел.: +7(495)4832295, факс: +7(495)4857990, kanel@ficpr.ac.ru
19. Карпенко Сергей Валентинович, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360030, КБР, Нальчик, пр. Кулиева, д.28, кв. 34, тел.: +7(8662)42-23-87, факс: +7(8662)42-39-71, sv\_karpenko@mail.ru
20. Ким Вадим Валерьевич, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, просп. акад. Н.Н. Семенова, д. 1, тел.: +7(495)7857029, факс: +7(495)7857029, kim@ficpr.ac.ru
21. Кочеткова Нина Сергеевна, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, просп. акад. Н.Н. Семенова, д.1, тел.: +7(495)7857029, факс: +7(495)7857029, gns@ficpr.ac.ru
22. Кузнецов Сергей Вячеславович, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, Ижорская, д. 13/19, тел.: +7(495)4859722, факс: +7(495)4857990, ksv@ihed.ras.ru
23. Кучеренко Михаил Геннадьевич, Организация не зарегистрирована, 460018, Оренбург, пр. Победы, 13, тел.: +7(353)2560529, факс: +7(353)2723701, rphys@mail.osu.ru
24. Ланкин Александр Валерьевич, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(095)485-8545, факс: +7(095)485-8545, lankin@ihed.ras.ru
25. Мамчуев Мухтар Османович, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, КБР, Нальчик, ул. Шортанова, 89 "а", тел.: +7(8662)42-23-87, факс: +7(8662)42-39-71, sv\_karpenko@mail.ru
26. Милявский Владимир Владимирович, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495) 4832295, факс: +7(495) 4857990, vlvm@ihed.ras.ru
27. Норман Генри Эдгарович, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, norman@ihed.ras.ru
28. Обручкова Лилия Римовна, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4842456, факс: +7(495)4857990, o\_liliya@ihed.ras.ru
29. Пикуз Сергей Алексеевич, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13/19, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, pikanuch@mail.ru
30. Савинцев Алексей Петрович, КБГУ, 360004, Нальчик, ул. Чернышевского, 173, тел.: +7(8662) 423777, факс: +7(495) 9563504, png@kbsu.ru
31. Ситников Дмитрий Сергеевич, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)362-77-88, факс: +7(495)362-77-88, rjr@iht.mpei.ac.ru
32. Скробков Олег Васильевич, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, просп. акад. Семенова, д. 1, тел.: +7(916)1108319, факс: (496)5153588, skreb@icpr.ac.ru
33. Смирнов Андрей Леонидович, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, пр-т Академика Н. Н. Семенова, д.1, тел.: (49652)25588, факс: (49651)55420, asm2@mail.ru
34. Соколов Сергей Николаевич, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495) 4832295, факс: +7(495) 4857990, real\_serg@mail.ru
35. Сосиков Василий Александрович, ИПХФ РАН, 142432, Московская область, Черноголовка, проспект ак. Семёнова д.1, тел.: +7(09652)24125, факс: +7(095)7857029, vaso@icpr.ac.ru
36. Стегайлов Владимир Владимирович, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, stegailov@ihed.ras.ru
37. Султанов Валерий Гулямович, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, просп. акад. Н.Н.Семенова, д.1, тел.: +7(495)7857029, факс: +7(495)7857029, sultan@ficpr.ac.ru
38. Темроков Анатолий Индербиевич, КБГУ, 360030, КБР, Нальчик, пр. Кулиева, д. 18, кв. 32, тел.: +7(8662)47-40-84, факс: +7(8662)42-39-71, sv\_karpenko@mail.ru
39. Торунов Сергей Иванович, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, пр-кт Семенова, д.1, тел.: +7(495)7857029, факс: +7(495)7857029, utkin@icpr.ac.ru
40. Уткин Александр Васильевич, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, пр-кт Семенова, д.1, тел.: +7(495)7857029, факс: +7(495)7857029, utkin@icpr.ac.ru
41. Фролов Александр Анатольевич, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13/19, тел.: +7(495)4859722, факс: +7(495)4857990, frolov@ihed.ras.ru
42. Хищенко Константин Владимирович, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4842456, факс: +7(495)4857990, konst@ihed.ras.ru
43. Черевко Александр Григорьевич, СибГУТИ, 630090, Новосибирская область, Новосибирск, ул. Золотогоринская, д.9/19, тел.: 7(383)3305121; 7(383)3332807, факс: 7(383)2112391, cherevko@mail.ru
44. Шутов Александр Владимирович, ИПХФ РАН, 141400, Московская обл., Черноголовка, пр.Семенова 1, тел.: +007(095)7857029, факс: +007(095)7857029, shutov@ficpr.ac.ru
45. Якушев Владислав Владиславович, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, Пр. Семенова д.1, тел.: 8(495)7857029, факс: 8(495)7857029, vvyakushev@mail.ru
46. Янилкин Алексей Витальевич, ИТЭС ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4842456, факс: +7(495)4857990, yanilkin@ihed.ras.ru