

# НОВЫЙ АФОН 2008

23 июля – 1 августа



6-й Российский симпозиум

## Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах

Тезисы докладов

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

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ  
6-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

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

В сборнике представлены тезисы докладов 6-го Российского симпозиума «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Новый Афон, 23 июля - 1 августа 2008 г.) Доклады отражают современное состояние исследований в следующих областях: прочность и пластичность твёрдых тел при высокоскоростной деформации, метастабильные состояния и их распад, ударные и детонационные волны, релаксация, химические реакции за фронтом ударной волны, неравновесная плазма, волны ионизации, пробой в газах, лазерная физика ультракоротких импульсов, взаимодействие мощных ионных, электронных и лазерных пучков с веществом, научные основы нанотехнологий. Рассмотрены экспериментальные исследования, теория и атомистическое моделирование релаксации и динамических процессов.

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

**ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

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

Симпозиум проведен при поддержке РФФИ (грант №08-02-06147).

Веб-сайт Симпозиума  
<http://www.ihed.ras.ru/afon08>

Фото Гегского водопада: Колесников С. А., ИПХФ РАН

Отпечатано в ИПХФ РАН, г. Черногоровка Московской области

## ОГЛАВЛЕНИЕ

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

<u>Канель Г.И.</u> Исследования поведения хрупких материалов в условиях ударно-волнового нагружения . . .	5
<u>Груздков А.А., Петров Ю.В., Волков Г.А.</u> Применение понятия инкубационного времени для моделирования динамической прочности: разрушение, пластичность, фазовые переходы . . . . .	5
<u>Жильев П.А., Куксин А.Ю., Янилкин А.В.</u> Молекулярно-динамическое исследование пластичности алюминия при высокоскоростном деформировании . . . . .	5
<u>Куксин А.Ю., Писарев В.В., Стегайлов В.В.</u> Оценка динамической прочности простых жидкостей на основе атомистического моделирования . . . . .	6
<u>Куксин А.Ю., Янилкин А.В.</u> Молекулярно-динамические расчеты и кинетические модели разрушения жидкостей . . . . .	6

### СЕКЦИЯ 2. МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ИХ РАСПАД

<u>Кузнецов В.В., Витовский О.В.</u> Волновые и тепловые процессы при распаде метастабильной жидкости .	7
<u>Востриков А.А., Псаров С.А., Дубов Д.Ю., Сокол М.Я.</u> Кинетика взрывного окисления углеводородов в сверхкритической воде . . . . .	7
<u>Сергеев О.В., Стегайлов В.В.</u> Флуктуации плотности в метастабильной леннард-джонсовской системе .	8
<u>Мионов В.А., Смирнов Л.А., Смирнов А.И.</u> Структура кильватерного следа за потенциальными барьерами, движущимися в бозе-эйнштейновском конденсате . . . . .	8
<u>Стариков С.В.</u> Предплавление железа при больших давлениях . . . . .	8
<u>Карпенко С.В.</u> Модель расчета термодинамических величин в модифицированной модели КНСП . . . . .	9
<u>Вайтанец О.С.</u> О кинетике В1-В2 фазового перехода в ионных кристаллах . . . . .	9
<u>Мамчуев М.О.</u> Модель металлизированной фазы ионного кристалла, индуцированной сверхвысоким давлением . . . . .	10
<u>Коровяков Д.А.</u> Проблема “обрезания” потенциала межатомного взаимодействия при молекулярно-динамических расчётах . . . . .	10
<u>Пахунова Ю.О.</u> Исследование полиморфных превращений при расчёте поверхностной энергии нанокристаллов с учётом поверхностных искажений . . . . .	11

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

<u>Миляевский В.В., Бородина Т.И., Жук А.З.</u> Динамический синтез кристаллического карбина . . . . .	13
<u>Петухов В.А., Набоко И.М., Бублик Н.П., Гусев П.А., Солнцева О.И., Онуфриев С.В., Гуткин Л.Д.</u> Экспериментальное моделирование распространения взрывных волн в водородно-воздушных смесях переменного состава . . . . .	13
<u>Орешкин В.И., Чайковский С.А., Ратахин Н.А., Дацко И.М.</u> Исследования электрического взрыва проводников в мегагауссных магнитных полях . . . . .	13
<u>Хищенко К.В.</u> Уравнение состояния и фазовые превращения титана при ударно-волновых воздействиях	13
<u>Ченцов А.В., Левашов П.Р.</u> Моделирование фазового равновесия жидкость-пар методом Монте-Карло в ансамбле Гиббса с учетом квантовых свойств молекул . . . . .	14
<u>Захаренков А.С., Поварницын М.Е.</u> Моделирование быстрых процессов в гидродинамике с использованием AMR . . . . .	14
<u>Можарова Т.С., Левашов П.Р., Поварницын М.Е.</u> Использование метода Годунова для моделирования разрывных МГД-течений . . . . .	14

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

<u>Ланкин А.В., Норман Г.Э.</u> Флуктуационный подход к описанию неидеальной плазмы . . . . .	16
<u>Орешкин В.И., Русских А.Г., Чайковский С.А., Федущак В.Ф.</u> Исследование перегреваемых неустойчивостей, развивающихся в процессе электрического взрыва проводников . . . . .	16
<u>Левашов П.Р., Филинов В.С., Бонич М., Фортон В.Е.</u> Квантовая динамика в вигнеровском и томографическом представлениях квантовой механики и расчет проводимости водородной плазмы .	17
<u>Стегайлов В.В.</u> Устойчивость твердого тела при различных температурах электронной подсистемы . . .	17
<u>Храпач И.Н., Ризаханов Р.Н., Полянский М.Н.</u> Эволюция состава и структуры высокотемпературного потока, содержащего частицы, в процессе нанесения покрытий плазменно-кластерным методом . . .	17

### СЕКЦИЯ 5. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ

<u>Андреев Н.Е., Кузнецов С.В.</u> Динамика электронного сгустка в кильватерной волне, генерируемой лазерным импульсом, с учетом самовоздействия его собственного заряда . . . . .	19
--	----

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

<u>Ашитков С.И., Агранат М.Б., Анисимов С.И., Жаховский В.В., Иногамов Н.А., Каменев В.Г., Комаров П.С., Нишихара К., Овчинников А.В., Петров Ю.В., Ситников Д.С., Хохлов В.А.</u> Исследование высокоскоростных деформаций в тонких металлических пленках под действием фемтосекундных лазерных импульсов . . . . .	20
--	----

<i>Скобелев И.Ю., Пикуз Т.А., Фаенов А.Я.</i> Спектры многозарядных полых ионов в рентгеновском излучении плотной лазерной плазмы . . . . .	20
<i>Чефонов О.В., Андрияш А. В., Вихляев Д. А., Гаврилов Д. С., Горохов С. А., Дмитров Д. А., Запысов А. Л., Какшин А. Г., Капустин И. А., Лобода Е. А., Лыков В. А., Потапов А. В., Пронин В. А., Санжисин В. Н., Сапрыжин В. Н., Сафронов К. В., Толстоухов П. А., Угоденко А. А., Чижков М. Н.</i> Исследование спектрально-углового распределения быстрых протонов с тыльной стороны мишени в экспериментах на установке СОКОЛ-П при плотности потока лазерного излучения порядка $10^{19}$ Вт/см <sup>2</sup> . . . . .	21
<i>Гасилов С. В., Пикуз Т. А., Скобелев И. Ю., Фаенов А. Я.</i> Абсорбционная и фазово-контрастная радиография микро и нанообъектов в мягком рентгеновском излучении фемтосекундной лазерной плазмы . . . . .	21
<i>Ефремов В.П., Демидов Б.А., Петров В.А., Мещеряков Р.Н., Потапенко А.И., Михайлова Л.И., Грибанов В.М., Метелкин С.Ю.</i> Разрушение полимерных материалов при импульсном воздействии потока электронов . . . . .	22
<i>Данилов В.П., Ульянчиков Р.В., Слободчиков С.С., Потапенко А.И.</i> Термомеханические эффекты в изделиях микроэлектроники при импульсном радиационном воздействии . . . . .	22
<i>Ефремов В.П., Потапенко А.И.</i> Исследование процессов гомогенизации пористой среды при действии интенсивного потока излучения . . . . .	22
<i>Петровский В.П., Агранат М.Б., Овчинников А.В.</i> Экспериментальные исследования реакции ПЗС линейки камеры «Sony» на воздействие фемтосекундных лазерных импульсов . . . . .	23
<i>Петровская Е.В., Петровский В.П.</i> Оценка нематериальных активов лаборатории лазерного воздействия как структурного подразделения ИТЭС ОИВТ РАН . . . . .	23

**СЕКЦИЯ 7. НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ НАНОТЕХНОЛОГИЙ**

<i>Рудяк В.Я.</i> Статистическая теория наножидкостей. мифы, достижения и проблемы . . . . .	24
<i>Башарин А.Ю., Турчанинов М.А., Дождиков В.С., Лысенко И.Ю.</i> Рост бездефектных графеновых слоев из углеродного пара по механизму пар-жидкость-кристалл . . . . .	24
<i>Востриков А.А., Федяева О.Н., Сокол М.Я., Фадеева И.И.</i> Синтез наночастиц $Me_xO_y$ при окислении металлов суб- и сверхкритической водой . . . . .	25
<i>Бочкарев А.А., Полякова В.И.</i> Нестационарность режимов формирования нанокомпозитов при совместном вакуумном осаждении двух компонент пара . . . . .	25
<i>Копцева А.А.</i> Размерные эффекты в нанокристаллах . . . . .	26
<i>Гавашели Д.Ш.</i> О некоторых упругих постоянных нанообъектов . . . . .	26

<b>ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ</b> . . . . .	28
<b>ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ</b> . . . . .	29

**ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ ХРУПКИХ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ  
УДАРНО-ВОЛНОВОГО НАГРУЖЕНИЯ**

*Канель Г.И.*  
*ОИВТ РАН, Москва*  
*kanel@fcr.ac.ru*

В настоящее время активно развиваются методы прогнозирования действия взрыва методами математического моделирования. Для расчетов необходимы сведения о свойствах материалов в этих условиях, которые получают из экспериментов с ударными волнами. В докладе представлен краткий обзор методов и результатов ударно-волновых исследований поведения минералов, керамик, стекол и монокристаллов, способов диагностирования хрупкого поведения при ударном сжатии и определяющих соотношений для расчета процессов деформирования и разрушения под действием взрывных нагрузок. Обсуждаются последние данные о волнах разрушения в стекле, диагностирование хрупкого разрушения при ударном сжатии путем варьирования поперечных напряжений, возможности измерений в условиях дивергентного ударного нагружения.

**ПРИМЕНЕНИЕ ПОНЯТИЯ ИНКУБАЦИОННОГО ВРЕМЕНИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ: РАЗРУШЕНИЕ, ПЛАСТИЧНОСТЬ, ФАЗОВЫЕ  
ПЕРЕХОДЫ**

*Груздков А.А.\*<sup>1</sup>, Петров Ю.В.<sup>2</sup>, Волков Г.А.<sup>1</sup>*  
*<sup>1</sup>СПбГУ, <sup>2</sup>ИПМАШ РАН, Санкт-Петербург*  
*\*gruzdkov@mail.ru*

В условиях достаточно медленного изменения параметров внешнего воздействия прочностные характеристики сплошных сред обладают определенной устойчивостью. Такие характеристики, как предел текучести или предел прочности для твердых тел, порог кавитации для жидкостей, температура плавления или кипения, широко используются в инженерной практике, значения этих величин приводятся в справочной литературе. В случае интенсивного кратковременного воздействия обнаруживается кардинальное отличие прочностных характеристик материалов. Этот факт обусловлен тем обстоятельством, что переходные процессы в структуре материала не протекают мгновенно, а имеют свою характерную длительность. Когда длительность воздействия становится соизмеримой с длительностью этих процессов, квазистатические модели становятся неадекватными.

Традиционно ситуацию пытаются исправить, рассматривая прочностные характеристики, как функцию скорости нагружения. Однако такой подход принципиально не способен описать многие экспериментально наблюдаемые эффекты. Другой подход состоит в отказе от использования традиционных инженерных понятий и использовании в расчетах моделей переходных процессов. Однако внедрение сложных микрофизических моделей непосредственно в инженерные расчеты оказывается проблематичным. Во-первых, как правило требуется знание большого числа параметров этих моделей, что как правило оказывается недостижимым. Использование же большого числа подгоночных параметров резко снижает прогностическую ценность моделей. Во-вторых, возникают сложности с подготовкой специалистов, способных использовать эти модели. Зачастую эти модели реально могут использовать только их авторы. Наконец, в этом случае неоправданно возрастает объем вычислительной работы, что иногда оказывается критическим.

В развиваемых нами подходах, основанных на понятии "инкубационного времени" предлагается дополнить традиционные характеристики минимально необходимым набором дополнительных параметров. Эти параметры могут определяться как на основании микрофизических моделей, так и на основании испытаний, проводимых на макроуровне. Данный подход приводит к созданию моделей, которые обладают относительной простотой, допускают непосредственное использование в инженерной практике. В то же время с их помощью можно объяснять многие явления, не описываемые традиционными моделями: возрастание предела текучести с ростом температуры, запаздывание плавления в ударных испытаниях и многие другие. С другой стороны, знание инкубационного времени и других характеристик, описывающих макроскопические свойства материалов, может служить ориентиром для совершенствования микрофизических моделей и уточнения их параметров.

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ АЛЮМИНИЯ  
ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ**

*Жиляев П.А., Куксин А.Ю.\*, Янилкин А.В.*  
*ОИВТ РАН, Москва*  
*\*kuksin@ihed.ras.ru*

С помощью метода молекулярной динамики изучается пластичность алюминия и его сплавов, обусловленная подвижностью дислокаций. Расчетная модель представляет собой монокристалл с единичной краевой дислокацией, находящейся в периодических граничных условиях. Используется потенциал погруженного атома ЕАМ, параметризованный для Al и его сплавов с Cu [1].

Рассматриваются движения дислокаций в динамическом режиме, когда сдвиговые напряжения настолько велики, что позволяют дислокациям свободно преодолевать барьеры Пайерлса. В таком случае скорость движения дислокаций ограничивается взаимодействием дислокации с колебаниями кристаллической решетки (фононным трением [2]). Рассчитана скорость движения дислокации в монокристалле алюминия в зависимости от приложенного напряжения сдвига и температуры. На основании полученных данных определена зависимость коэффициента фононного трения дислокаций от температуры, оказавшаяся почти линейной. Отклонения от линейной зависимости проявляются лишь при температурах, близких к температуре плавления.

Оценены предельные напряжения, необходимые дислокации для преодоления препятствий нанометрового размера: кластеров меди и полостей. С ростом температуры для больших кластеров наблюдается снижение

предельного напряжения, в то время как время, необходимое для преодоления кластера, наоборот, возрастает. Обсуждается связь полученных результатов с измерениями динамических пределов текучести в ударно-волновых экспериментах [3].

1. Liu X.-Y., Xu Wei, Foiles S.M., Adams J.B. // Appl. Phys. Lett. 1998. V.72. №13. P.1578
2. Альшиц В.И., Инденбом В.Л. // УФН. 1975. Т.115. №1. С.3.
3. Канель Г.И., Фортов В.Е., Разоренов С.В. // УФН. 2007. Т.177. №8. С.809.

## ОЦЕНКА ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

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

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*pisarevvv@gmail.com*

Имеются экспериментальные данные по прочности жидкостей при динамическом растяжении [1]. В эксперименте наблюдается слабая логарифмическая зависимость откольной прочности от скорости деформации.

Для моделирования процесса разрушения на микроуровне использовался метод молекулярной динамики (МД). Рассматривалась система частиц с межчастичным потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса с параметрами, выбранными так, чтобы описывался гексан [2].

В данной работе прочность жидкости оценивалась на основе модели «нуклеация и рост полостей». Сначала в ходе молекулярно-динамических расчетов находилось время жизни метастабильной жидкости при различных давлениях с помощью метода, предложенного в работе [3]. Он основан на усреднении времени жизни метастабильной фазы по ансамблю независимых МД-траекторий. Частота гомогенной кавитации  $J$  – число критических зародышей, образующихся в единице объема в единицу времени – определялась по формуле  $J = 1/(\bar{\tau}V)$ , где  $\bar{\tau}$  – среднее время жизни метастабильной фазы,  $V$  – объем системы. Таким образом была определена зависимость скорости зарождения полостей от давления при заданной температуре. При помощи метода молекулярной динамики также определялась скорость роста полости при различных давлениях. Затем по этим данным оценивалась откольная прочность жидкости при растяжении с постоянной скоростью. За момент откола принимался момент, когда скорость роста полостей сравнивалась со скоростью деформации.

1. Сосиков В.А. Экспериментальное исследование импульсного растяжения жидкостей при ударно-волновом воздействии. / Диссертация на соискание ученой степени к.ф.-м.н. Черноголовка, 2006
2. Справочник химика. Т.1. М., Л.: Химия, 1966. С.390.
3. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. ДАН. 2002. Т.386 С.328.

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАЗРУШЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ

*Куксин А.Ю., Янилкин А.В.\**

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*yanilkin@ihed.ras.ru*

В работе на основе метода молекулярной динамики (МД) исследуется начальный этап разрушения жидкости. Рассматриваются две системы: простые жидкости, описываемые Леннардом-Джонсом, и алюминий, описываемый потенциалом погруженного атома ЕАМ [1]. Первая часть посвящена исследованию флуктуаций в виде зарождающихся пузырьков. Определены распределения по размерам, временам жизни. Проведено сравнение с классической формулой нуклеации Скрипова [2]. Значение поверхностного натяжения, необходимого для расчета скорости нуклеации, определено из МД расчетов для разных значений давления и температур. Во второй части рассматривается множественное зарождение полостей. Проводятся сравнения расчета с несколькими моделями разрушения.

1. Liu X.-Y., Wei Xu, Foiles M.M., Adams J.B. // App. Phys. Lett. 1998. V.72. №13. P.1578.
2. Скрипов В.П., Файзулин М.З. Фазовые переходы кристалл-жидкость-пар и термодинамическое подобие. М.: Физматлит, 2003.

ВОЛНОВЫЕ И ТЕПЛОВЫЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ РАСПАДЕ МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ

*Кузнецов В.В.\* , Витовский О.В.*

*ИТ СО РАН, Новосибирск-90*

*\*vladkuz@itp.nsc.ru*

Рассмотрены тепловые и волновые процессы, возникающие в жидкости при её сверхбыстром переводе в метастабильное состояние импульсным нагревом, и при быстром снижении давления в жидкости. Предложена модель самосогласованного спонтанного зародышеобразования и роста паровых пузырей при фазовом взрыве на тепловыделяющей поверхности, учитывающая генерацию волны давления в жидкости. Для расчёта поля давления использована двухзонная схема генерации волны давления в сжимаемой жидкости растущими пузырями. На её основе развита теория пузырькового распада метастабильной жидкости в ограниченном объёме. Детально учтён механизм подвода тепла к межфазной поверхности, как из окружающей жидкости, так и через микрослой. Проведены расчёты фазового взрыва воды и спиртов на гладкой и наноструктурной поверхности многослойного микронагревателя. Получены данные по динамике числа пузырей, накопленного объёма пара; структуре излучаемой волны давления в зависимости от темпа нагрева жидкости. Показано, что взаимодействие пузырьков радикально влияет на динамику фазового взрыва и его учёт имеет принципиальное значение. Определены условия, при которых пузырьковый распад метастабильной жидкости имеет автоволновой характер с последовательной генерацией и подавлением волн вскипания. Проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными [1].

Фазовые переходы при существенной термодинамической неравновесности проходят в условиях высокой интенсивности потоков тепла и массы, приводящих к неустойчивости межфазной поверхности жидкость-пар и самоорганизации поверхностных структур. Теоретически и экспериментально изучены закономерности распада метастабильной жидкости и смеси жидкостей в сосуде, индуцированного быстрым сбросом давления. Опыты проведены при начальных перегревах монофтортрихлорметана от 10 до 120 К в цилиндрическом рабочем участке диаметром 18 мм с прозрачными стенками. Получено, что при подавлении центров кипения на стенках распад метастабильной жидкости инициируется волной зарождения центров кипения в приповерхностном слое жидкости, выбросом пересыщенного пара и интенсивному локальному динамическому воздействию на жидкую фазу, приводящему к генерации турбулентного движения в окрестности межфазной поверхности. Выделены режимы самоподдерживающегося распада метастабильной жидкости с локализованной волной поверхностного фазового перехода, интенсивный подвод тепла к которой поддерживается высокой степенью турбулентности в окружающей жидкости. Обнаружено пульсирующее движение волны поверхностного фазового перехода, обусловленное нестационарным подводом тепла. На основе теории неравновесного испарения построена модель поверхностного распада метастабильной жидкости. Проведены расчёты скорости волны фазового перехода в зависимости от температуры жидкости и давления в паровой фазе. Получены коэффициенты теплоотдачи на межфазной поверхности, что позволило замкнуть модель поверхностного распада метастабильной жидкости.

Кипение хладонов в микросистемах характеризуется высокой степенью неравновесности и определяющим влиянием капиллярных сил на режим течения и теплообмена. Получено, что при малых тепловых потоках зародыши кипения возникают на готовых центрах на входе в микроканал. Вниз по потоку зародышеобразование подавлено и определяющим является испарение жидкости в микрослое и на межфазной поверхности сжатых пузырей-снарядов. Рассмотрена форма межфазной поверхности в стесненных условиях и выделены области аномально высокой скорости испарения жидкости.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, грант 08-08-00953-а.

1. Kuznetsov V.V., Vasserman E.S. // Proc. 3rd International Symposium on Two-Phase Flow Modelling and Experimentation, Pisa, 2004, paper ven 04.

КИНЕТИКА ВЗРЫВНОГО ОКИСЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ В СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ВОДЕ

*Востриков А.А.\* , Псаров С.А., Дубов Д.Ю., Сокол М.Я.*

*ИТ СО РАН, Новосибирск-90*

*\*vostrikov@itp.nsc.ru*

В последние годы резко активизированы исследования, направленные на использование воды при сверхкритических параметрах ( $T > 647$  К,  $P > 22.1$  МПа) для создания новых экологически чистых технологий конверсии низкосортных топлив (углей, гудрона, биомассы, биоилов и др.) в эффективные топлива, в частности, в водород и синтеза наноструктурированных материалов.

Сверхкритическая вода (СКВ) обладает свойством практически неограниченно растворять органические вещества (ОВ) [1] и окислять неорганические вещества с образованием наночастиц [2]. Возможность получения высокой плотности водных флюидов (близкой к плотности жидкой воды) при сохранении газоподобного состояния обеспечивает реализацию высоких скоростей реакций термоллиза ОВ и частичного или полного окисления ОВ в СКВ/О<sub>2</sub> флюидах. Высокие скорости окисления и разложения воды инициируют как положительные, так и отрицательные эффекты. К последним относятся: возникновение автоколебаний параметров реакционной смеси и даже разрушение реакторов при взрывных режимах окисления.

В данной работе представлены результаты исследования взрывного окисления углеводородов (бензола, нафталина и гудрона) при импульсном введении их в реактор с СКВ/О<sub>2</sub> флюидом. Впрыск топлива в реактор осуществляли с помощью мультипликатора за время, не превышающее 15 мс. Использовали трубчатый реактор длиной 127 мм и объемом 10 см<sup>3</sup>, который рассчитан на импульсы давления до 130 МПа при температуре до 1300 К. Давление реактантов измеряли мембранным тензодатчиком. Состав продуктов окисления определяли с помощью квадрупольного масс-спектрометра после завершения процесса. Схема экспериментального стенда описана в [3].

В экспериментах получены временные зависимости давления  $P(t)$  после впрыска топлива в нагретый реактор с СКВ/ $O_2$  флюидом. Начальные условия изменялись в диапазоне  $P=27-38$  МПа,  $T=700-1073$  К, концентрация топлива – 0.36, кислорода – 0.85 и воды от 7 до 20 моль/л. После впрыска топлива наблюдали резкий рост  $P(t)$ , связанный с саморазогревом смеси за счет теплового эффекта реакций окисления. Из анализа системы уравнений, характеризующих тепловой взрыв в реакторе постоянного объема с использованием данных о составе продуктов окисления и уравнения состояния смеси Редлиха-Квонга были получены временные зависимости скорости тепловыделения  $W(t)$ .

Анализ зависимостей  $W(t)$  для бензола показал наличие изломов, вызванных скачком величины  $W$ . Момент первого скачка соответствует переходу от стационарного окисления к нестационарному цепно-теловому режиму окисления активными частицами (АЧ). Экспоненциальный рост количества АЧ вызывает экспоненциальный рост  $W(t)$ . Окисление нафталина в СКВ в условиях экспериментов оказалось стационарным. Сложный характер зависимости  $W(t)$  при окислении гудрона объясняется многокомпонентностью его состава и наложением различных режимов взрывного окисления. Для стационарного режима окисления бензола, нафталина и гудрона в СКВ/ $O_2$  флюиде получены кинетические уравнения, описывающие тепловыделение, и определены время индукции теплового взрыва и критическая температура воспламенения смеси. Скорость тепловыделения увеличивается с увеличением диэлектрической проницаемости смеси (плотности СКВ). Это явление хорошо описывается моделью полярного переходного комплекса в среде диэлектрической проницаемостью отличной от единицы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты No 05-08-17892, No 06-08-00717, No 07-03-00698).

1. Tsonopoulos C. // Fluid Phase Equilibria. 2001. V. 186. P. 185-206.
2. Востриков А.А., Шипкин А.В., Тимошенко Н.И. // Изв. АН (Сер. хим.). 2006. №12. С. 2133-2135.
3. Востриков А.А., Дубов Д.Ю., Псаров С.А. // Изв. АН (Сер. хим.). 2001. №8. С. 1409-1412.

## ФЛУКТУАЦИИ ПЛОТНОСТИ В МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ЛЕННАРД-ДЖОНСОВСКОЙ СИСТЕМЕ

*Сергеев О.В.\* , Стегайлов В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*seoman@yandex.ru*

В работе изучаются флуктуации плотности в метастабильной жидкости. Для анализа используются результаты молекулярно-динамического моделирования системы с потенциалом Леннарда-Джонса. С помощью пространственного и временного преобразований Фурье получены спектры флуктуаций плотности [1] для нескольких метастабильных состояний жидкости. В области не очень большой метастабильности динамический структурный фактор  $S(\omega, k)$  имеет четко выраженный пик при отличной от нуля частоте  $\omega_{max}$ , прямо пропорциональной модулю волнового вектора  $k$ . Зависимость положения пика  $\omega_{max}(k)$  отражает закон дисперсии коллективных колебаний атомов [2]. С увеличением  $k$  высота пика уменьшается, таким образом, существует предельное значение  $k_0$ , при котором пик еще выделяется. Установлены закономерности изменения вида динамического структурного фактора с приближением к границе устойчивости вдоль изотермы и вдоль изобары. В частности, предельная величина  $k_0$  с приближением к границе устойчивости уменьшается.

1. Hansen J.P., Klein M.L. // Phys. Rev. B. 1976. V.13. №2. P.878.
2. Boon J.P., Yip S. Molecular hydrodynamics. New York: Dover Publications, 1991.

## СТРУКТУРА КИЛЬВАТЕРНОГО СЛЕДА ЗА ПОТЕНЦИАЛЬНЫМИ БАРЬЕРАМИ, ДВИЖУЩИМИСЯ В БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКОМ КОНДЕНСАТЕ

*Миронов В.А., Смирнов Л.А., Смирнов А.И.\**

*ИПФ РАН, Нижний Новгород*

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

В рамках приближения среднего поля рассмотрена двумерная задача о возбуждении бозе-эйнштейновского конденсата (БЭК) подвижными потенциальными барьерами. В линейном приближении при сверхзвуковом движении за барьером образуется область тени в виде конуса Маха. Граница этой области играет роль каустики, и возмущения плотности вблизи нее на больших расстояниях от источника описываются производной функции Эйри. В нелинейном режиме сильно возмущающие бозе-конденсат сверхзвуковые барьеры оставляют за собой кильватерный след из четного числа провалов концентрации (темных солитонов), лежащих внутри конуса Маха. Их ширина, число и угол расхождения зависят как от параметров барьера, так и от характеристик самого конденсата. Из-за развития модуляционной неустойчивости кильватерный след эволюционирует в набор дорожек из вихревых пар. В случае дозвукового движения потенциала могут возбуждаться пары “вихрь-антивихрь”. Для этого скорость препятствия должна превышать некоторое критическое значение.

## ПРЕДПЛАВЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ БОЛЬШИХ ДАВЛЕНИЯХ

*Стариков С.В.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*starikov@ihed.ras.ru*

Кривая плавления железа, полученная методом статических измерений, лежит в области более низких температур, чем эта же зависимость, полученная в динамических измерениях [1,2]. Одним из основных отличий двух методов является то, что плавление в статических измерениях происходит на поверхности образца граничащего с неупорядоченной средой, тогда как в динамических измерениях изучается плавление в объеме. В данной работе методом молекулярной динамики исследовано предплавление железа (эффекта имеющего много общего с контактным плавлением металлов [3]) при больших давлениях в условиях контакта с аморфным аргоном.



Особое внимание уделено толщине неупорядоченного слоя железа на границе раздела компонент и способности поверхности деформироваться при предплавлении. Возможность влияния данного явления на интерпретацию результатов статических измерений обсуждается.

1. Фунтиков А.И. // ТВТ. 2003. Т.41. С.954.
2. Boehler R. // Review geophysical. 2000. V.38. P.221.
3. Коротков П.К., Орквасов Т.А., Созаев В.А. // Письма в ЖТФ. 2006. Т.32. вып.2. С.28.

## МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН В МОДИФИЦИРОВАННОЙ МОДЕЛИ КНСП

*Карпенко С.В.*

*НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик*

*sv\_karpenko@mail.ru*

Из всех существующих теорий коррелированных несимметризованный метод самосогласованного поля (КНСП) лучше других зарекомендовал себя в исследованиях структурных, динамических и термодинамических свойств ангармонического кристалла при температурах отличных от абсолютного нуля [1].

В КНСП каждый атом кристалла рассматривается как движущийся в эффективном самосогласованном поле, создаваемом всеми другими атомами. Это поле описывается самосогласованным потенциалом

$$u_i = \sum_j \int \Phi(|r_i - r_j|) w_j(r_j) dr_j - \frac{1}{2} \sum_j \int \phi(|r_i - r_j|) w_j(r_j) dr_i dr_j \quad (1)$$

через который выражаются одночастичные плотности вероятности

$$w_j(r_j) = \exp \left[ -\frac{u_i(r_i)}{\theta} \right] / \int \exp \left[ -\frac{u_i(r_i)}{\theta} dr_i \right] \quad (2)$$

$\theta = kT$  - температура в энергетических единицах. Для улучшения метода КНСП нужно учесть корреляционное движение частиц в кристалле. Запишем цепочку уравнений Боголюбова для нахождения функций  $w(q_1)$  и  $w(q_1, q_2)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial w(q_1)}{\partial q_{1\alpha}} + \frac{1}{\theta} \int K(q_1, q_2) w(q_1, q_2) dq_2 &= 0 \\ \theta \frac{\partial w(q_1, q_2)}{\partial q_{1\alpha}} + \frac{\partial \phi(q_1, q_2)}{\partial q_{1\alpha}} w(q_1, q_2) + \int \frac{\partial \phi(q_1, q_2)}{\partial q_{1\alpha}} w(q_1, q_2, q_3) dq_3 &= 0, \\ K(q_1, q_2) &= \sum_a \Phi(q_1 - q_2 - a_j). \end{aligned}$$

Функция  $K(q_1, q_2)$  имеет смысл потенциальной энергии кристалла.

Для решения системы уравнений поступим следующим образом. Представим трехчастичную функцию распределения в суперпозиционном приближении Кирквуда

$$w(q_1, q_2, q_3) = w(q_1, q_2) w(q_2, q_3) w(q_1, q_3). \quad (3)$$

Решая систему уравнений с учетом условия (3) получим явное выражение для функции  $w(q_1, q_2)$ . Для того, чтобы учесть корреляции движений можно воспользоваться вариационным методом Боголюбова.

Для сравнения уравнений состояния кристалла без учета коллективных колебаний его частиц и с учетом этих колебаний приведем выражение для внутренней энергии кристалла в новом приближении.

$$E = -\frac{1}{2\theta} \sum_j \int [\Phi(q_i, q_j) - \frac{1}{2N} \int \Phi(q_i, q_j) w_j(q_j) w_i(q_i) dq_j]^2 w_j(q_j) w_i(q_i) dq_j$$

где  $E_{\text{кнссп}}$  - внутренняя энергия, полученная без учета корреляции частиц.

1. Базаров И.П., Николаев П.Н. Корреляционная теория кристалла. М.: МГУ, 1983. 232 с.

## О КИНЕТИКЕ В1-В2 ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

*Вайтанец О.С.*

*НИИ ПМА КБНЦ РАН, 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.

Переход из исходной фазы, термодинамически устойчивой при  $p = 0$   $T = 0$ , в фазу высокого давления сопровождается соответственно увеличением плотности или энтропии. Среди классификации полиморфных превращений по каким-либо свойствам: термодинамическим, кристаллографическим, по номеру координационной сферы, в которой происходит изменение числа узлов и др. [3] имеется и кинетическая классификация. Она с некоторой степенью условности разделяет переходы на быстрые и медленные. Из двух кинетических механизмов фазовых переходов: диффузионного (с активацией отдельных атомных частиц и преодолением энергетических барьеров каждым атомом или молекулой индивидуально) и мартенситного (с кооперативной перестройкой

кристаллической решетки) каждый из них в зависимости от внешних условий может быть как быстрым, так и медленным. Широкий диапазон изменения давления при фазовом превращении является одним из свидетельств сложности кинетики перехода, при которой мартенситная перестройка может быть лишь одной из промежуточных стадий полного превращения [4].

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 концентрации новой фазы данный процесс может идти вплоть до  $x = 1$ , где  $x$  - концентрация образующейся фазы в системе.

Пока расстояние между двумя ближайшими кластерами меньше некоторого критического, характеризуемого радиусом корреляции  $\rho$  который определяется согласно выражению  $\frac{4\pi}{3}(\rho)^3 = \bar{n}\nu$  ( $\bar{n}$  - среднее число узлов в кластере,  $\nu$  - средний объем, приходящийся на частицу в кластере), критическая доля объема новой фазы недостаточна для образования нового кластера. Существует критическое значение объема новой фазы, определяемое следующим образом)  $\xi_c = \frac{\Delta_0}{\nu_0} \left(\frac{z}{1.5}\right)^{1/(a \cdot z)}$  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.

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. Кузнецов Н.М. // Ударные волны и экстремальные состояния вещества. М.: Наука, 2000. С. 174.

## МОДЕЛЬ МЕТАЛЛИЗИРОВАННОЙ ФАЗЫ ИОННОГО КРИСТАЛЛА, ИНДУЦИРОВАННОЙ СВЕРХВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

*Мамчурев М.О.*

*НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик*

*sv\_karpenko@mail.ru*

Согласно модели металлического состояния простейшие металлы содержат в решетке положительные ионы металла и равномерно распределенный электронный газ валентных электронов (электронов проводимости). Существенной чертой этой модели является то, что электроны проводимости, рассматриваются отдельно от электронов атомных остовов, причем их поведение в эффективном потенциальном поле ионов металла определяется с помощью квантово-механического метода. Энергия решетки, приходящаяся на элементарный шар складывается, с одной стороны, из собственной энергии электронного газа, с другой стороны, из энергии взаимодействия электронного газа с ионами в элементарном шаре. Энергия электронного газа металла складывается из электростатической кулоновской  $E_C$ , кинетической нулевой энергии электронов  $E_K$ , взаимной обменной энергии электронов  $E_A$  и корреляционной энергии электронов  $E_W$ .

Энергия взаимодействия ионов с электронным газом металла в элементарном шаре распадается на следующие части: кулоновскую энергию взаимодействия  $W_C$  точечного ионного заряда с электронами металла, кинетическую энергию  $W_K$ , связанная с дополнительным потенциалом  $F$ , некулоновскую электростатическую энергию  $W_E$ , обусловленную проникновением электронов проводимости в электронное облако иона и кинетическую энергию. Кроме этих энергий нужно учесть еще энергию  $W_A$ , обменного взаимодействия электронов проводимости с электронами атомного остова. Она также связана с проникновением электронов проводимости в электронное облако металлического иона, но имеет относительно меньшее значение, чем  $W_C$ ,  $W_E$ ,  $W_K$ . Энергия  $W_A$ , определяется как изменение обменной энергии вследствие наложения электронного газа металла.

Основной вклад в энергию металла дает  $W_C$ -кулоновская энергия взаимодействия между точечным ионным зарядом и электронным газом металла и электростатическая энергия притяжения  $W_E$ . Существенный вклад также дает обменная энергия электронного газа металла  $E_A$ , энергия отталкивания  $W_K$ , происходящая за счет неклассического дополнительного потенциала.

В работе [2] были построены модели диэлектрической и металлизированной фазы ионного кристалла. В рамках метода функционала электронной плотности (МФП) проведено изучение фазового перехода "диэлектрик-металл" в галогенидах щелочных металлов в условиях сверхвысоких давлений. Рассчитаны значения давлений металлизации для бесконечных щелочно-галлоидных кристаллов.

1. Гомбаш П. Статистическая теория атома и ее применение. М.: Изд-во Иностран. лит., 1951. 270 с.
2. Карпенко С.В. Мамчурев М.О. Фазовый переход "диэлектрик - металл" в ионных кристаллах при всестороннем сжатии  
Фундаментальные исследования. 2006. № 4. С. 11-14

## ПРОБЛЕМА "ОБРЕЗАНИЯ" ПОТЕНЦИАЛА МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ РАСЧЁТАХ

*Коровяков Д.А.*

*НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик*

*sv\_karpenko@mail.ru*

В данной работе предложена корректная процедура "обрезания" потенциала межатомного взаимодействия частиц, позволяющая решить проблему дрейфа полной энергии системы [1]. Кинетическая  $E_k$  и потенциальная  $U$

энергии не являются сохраняющимися величинами для изолированной системы и изменяются от точки к точке вдоль генерируемой траектории

$$\overline{E_k} = \lim_{t' \rightarrow \infty} (t' - t_0)^{-1} \int_{t_0}^{t'} E_k(v(t)) dt, U = \lim_{t' \rightarrow \infty} (t' - t_0)^{-1} \int_{t_0}^{t'} U(r(t)) dt.$$

Генерируемая траектория является дискретной и  $E_k$  усредняется по времени в дискретных точках

$$\overline{E_k} = (n - n_0)^{-1} \sum_{\nu > n_0} E_k^\nu, E_k^\nu = \sum_i \frac{1}{2} m(v_i^2).$$

Нас интересует вычисление наблюдаемых величин в термодинамическом пределе, в котором все ансамбли эквивалентны и можно использовать теорему о равномерном распределении.

Предположим, что потенциал обрезается на расстоянии  $r_c$ . Тогда средняя внутренняя конфигурационная энергия будет иметь вид

$$\overline{U} = (n - n_0)^{-1} \sum_{\nu > n_0} U^\nu, U^\nu = \sum_{i < j} U(r_{ij}^\nu).$$

В общем случае потенциальная энергия записывается в форме

$$\frac{U}{N} = 2\pi\rho \int_0^\infty U(r)g(r)r^2 dr,$$

где  $g(r)$  - парная корреляционная функция, которая характеризует независимые во времени корреляции движения частиц.

Пусть  $n(r)$  - среднее число частиц, расположенных на расстоянии  $r, \dots, r + \Delta r$  от данной частицы, тогда

$$g(r) = \frac{V}{N} n(r) / 4\pi r^2 \Delta r.$$

При вычислении  $g(r)$  все расстояния берутся из процедуры вычисления сил. Так как  $g(r)$  не зависит от времени, можно выполнить временное усреднение. Функция  $g(r)$  вычисляется на расстояниях, строго меньших половины линейного размера МД - ячейки.

$$U_c = 2\pi\rho \int_{r_0}^\infty U(r)g(r)r^2 dr.$$

Расчеты для системы из  $N = 10^6$  частиц для кристалла хлорида натрия показали, что предложенная методика "коррекции обрезания" позволяет избавиться от дрейфа энергии и решить проблему саморазогрева системы.

1. Карпенко С.В., Кяров А.Х., Темроков А.И. // Кристаллография. 2005. Т. 50. № 5. С. 880 - 886.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ РАСЧЁТЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ НАНОКРИСТАЛЛОВ С УЧЁТОМ ПОВЕРХНОСТНЫХ ИСКАЖЕНИЙ

*Пахунова Ю.О.*

*НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик*

*sv\_karpenko@mail.ru*

Рассматривая полиморфные превращения в ионных кристаллах конечных размеров, в выражение для термодинамического потенциала необходимо добавить член, описывающий поверхностную энергию кристалла

$$G_{Bi} = G_{Bi}^V + G_{Bi}^S, \quad (1)$$

где  $G_{Bi}^V$  - объемная часть термодинамического потенциала,  $G_{Bi}^S$  - его поверхностная часть.

В рамках общего термодинамического подхода Гиббса для плоской границы раздела двух фаз, считающихся однородными вплоть до границы раздела, избыточный поверхностный термодинамический потенциал системы равен

$$G_S = \frac{G - G_1 - G_2}{S}, \quad (2)$$

где  $G$  - общий термодинамический потенциал системы,  $G_1$  и  $G_2$  - соответствующие потенциалы фаз,  $S$  - площадь границы раздела. Для межфазной границы кристалл - вакуум  $G_2 = 0$ . Используя это общее определение, для поверхностной энергии грани  $(hkl)$  полубесконечного кристалла имеем (при  $T = 0K$ )

$$\sigma(hkl) = \sum (E_i - E_\infty) n_i(hkl). \quad (3)$$

Если считать, что полубесконечный кристалл характеризуется такими же межчастичными расстояниями (и симметрией), что и бесконечный кристалл, то определение (2) эквивалентно определению по Борну

$$\sigma(hkl) = \frac{A_{12}}{2S}. \quad (4)$$

Здесь  $A_{12}$  - работа разделения бесконечного кристалла на две части вдоль поверхности раздела  $(hkl)$ , имеющей площадь  $S$ . Определение (4) является более общим, поскольку позволяет разделить энергию на две составляющие

$$\sigma_1(hkl) = \frac{1}{S} \left[ \frac{B_1}{R_0} + [B_2(C_{++} + C_{--}) + B_3C_{+-}]R_0^{-6} - \Delta U(hkl) \right], \quad (5)$$

где  $B_1, B_2, B_3$  - численные константы, отражающие структуру;  $R_0$  - межчастичное расстояние;  $S$  - удвоенная площадь поверхности, приходящаяся на один ион;  $C_{(+-)}$  - дисперсионные константы взаимодействия ионов, вычисленные в дипольном приближении;  $\Delta U(hkl)$  - избыточная энергия одного иона, связанная с некулоновскими составляющими энергии взаимодействия. Вклад искажений поверхностной области кристалла  $\sigma_2(hkl)$ :

$$\sigma_2(hkl) = \sum_{i=1}^{\infty} \left\{ \frac{\partial \sigma_1(x_i)}{\partial x_i} \delta x_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma_1(x_i)}{\partial x_i^2} \delta x_i^2 + \frac{n_i(hkl)}{R_0^3} E_Z^2(x_i) (q_1 \alpha_{+} \alpha_{-} + q_2 \alpha_{+}^2 + q_3 \alpha_{-}^2) \right\}. \quad (6)$$

Здесь  $\alpha_{+(-)}$  - поляризуемость положительного (отрицательного) иона, константы  $q_1, q_2, q_3$  зависят от типа грани;  $E_Z(x_i)$  - избыточное электрическое поле, действующее на ионы, находящиеся на  $i$  - том слое;  $\delta x_i$  - величина смещения поверхностных слоев.

**ДИНАМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КАРБИНА**

*Милявский В.В.\* , Бородин Т.И., Жук А.З.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*vlvm@ihed.ras.ru*

В работе проанализированы результаты динамических экспериментов, направленных на синтез кристаллического карбина: ударно-волновая кристаллизация аморфного карбина; лазерный синтез кристаллического карбина из пиролигического графита и рентгеноаморфного двумерно-упорядоченного линейно-цепочечного углерода; ударно-волновой синтез кристаллического карбина из высокоориентированного графита. Выполнен обзор литературы по проблеме синтеза кристаллического карбина. Обсуждаются различные механизмы полиморфного превращения графита в карбин и перспективы получения кристаллического карбина в макроскопическом количестве.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №07-08-12170).

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВЗРЫВНЫХ ВОЛН В  
ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЯХ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА**

*Петухов В.А.\* , Набоко И.М., Бублик Н.П., Гусев П.А., Солнцев О.И., Онуфриев С.В.,  
Гуткин Л.Д.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*petukhov@ihed.ras.ru*

Вопросы горения водородно-воздушных смесей тесно связаны с проблемой безопасности. Однако использование результатов научных исследований для анализа аварийных ситуаций затруднено тем, что имеющиеся результаты по горению газовых смесей в основном получены для предварительно перемешанных смесей, а на практике чаще приходится иметь дело с сильно перемешанными смесями. В данной работе проведено экспериментальное моделирование распространения взрывных волн в водородно-воздушных смесях переменного состава. Двухкамерный реакционный объем образован жестким конусом (верхняя часть) и герметично присоединенным к нему «мешком», изготовленным из тонкой резиновой оболочки, (нижняя часть). Верхняя и нижняя части разделены тонкой резиновой пленкой и могут заполняться водородно-воздушной смесью различного состава. При движении взрывных волн из нижнего объема, заполненного стехиометрической водородно-воздушной смесью, в верхний (жесткий) объем, заполненный обедненной смесью, реализуется режим, при котором давление в вершине конуса значительно превышает соответствующее давление при заполнении обеих частей объема стехиометрической водородно-воздушной смесью. Полученные результаты определяют направление дальнейших исследований и имеют большое значение для решения вопросов безопасности объектов водородной энергетики.

**ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВЗРЫВА ПРОВОДНИКОВ В МЕГАГАУССНЫХ  
МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ**

*Оreshkin В.И.\* , Чайковский С.А., Ратахин Н.А., Дацко И.М.*

*ИСЭ СО РАН, Томск*

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

Эксперименты по взрыву проводников проводились на установке МИГ при токах около 3 МА с фронтом нарастания 80 нс. Исследовались два различных режима взрыва: режим скинирования тока; режим квазиоднородного распределения тока. Для реализации этих режимов использовались как сплошные так и полые проводники различных диаметров. Вещество проводников: алюминий, медь, железо. В экспериментах кроме осциллографических измерений тока и напряжения регистрировалась мощность собственного излучения в ультрафиолетовом и мягком рентгеновском диапазонах спектра. Результаты экспериментов интерпретировались с помощью расчетов по МРГД программе, в которой используются широкодиапазонное уравнение состояния и учитывается перенос излучения плазмы.

Получены следующие результаты. В режиме однородного распределения тока момент взрыва определяется интегралом удельного действия тока, величина которого остается приблизительно. В режиме скинирования тока взрыв поверхности проводников происходит в момент времени, когда плотность магнитной энергии на поверхности достигает значений равных 1.5-2 значениям плотности энергии сублимации металла при нормальных условиях..

Работа поддержана грантами РФФИ № № 07-02-00186-а и № 08-08-90418.

**УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ТИТАНА ПРИ  
УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ**

*Хищенко К.В.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*konst@ihed.ras.ru*

Развита полуэмпирическая модель уравнения состояния металла с учетом полиморфных фазовых превращений, плавления и испарения. Проведены расчеты термодинамических характеристик трех кристаллических модификаций и жидкой фазы титана в широком диапазоне давлений и температур. Выполнено сопоставление расчетных результатов с имеющимися ударно-волновыми данными. Полученное многофазное уравнение состояния титана может быть эффективно использовано в численном моделировании процессов в конденсированных средах при интенсивных импульсных воздействиях.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ ЖИДКОСТЬ-ПАР МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО В АНСАМБЛЕ ГИББСА С УЧЕТОМ КВАНТОВЫХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛ

*Ченцов А.В.\* , Левашов П.Р.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*alche8411@mail.ru*

В работе представлены результаты расчетов термодинамических свойств и кривой равновесия жидкость-пар с учетом квантовых эффектов на примере неона, проведенных методом Монте-Карло с использованием интеграла по траекториям в каноническом ансамбле и ансамбле Гиббса. Основная идея работы заключается в корректном учете квантовых эффектов при моделировании термодинамических свойств квантовых систем. Известно, что в современных экспериментальных установках образуется плотная неидеальная плазма, и правильное описание ее свойств необходимо для успешного объяснения сложных процессов, протекающих в них. В работе были рассчитаны термодинамические свойства неона, а также бинадаль неона с учетом и без учета квантовых эффектов. Было показано, что при учете квантовых эффектов область сосуществования жидкость-пар на фазовой диаграмме неона в координатах температура-плотность уменьшается в хорошем согласии с экспериментом.

В будущем планируется применить этот метод для моделирования фазового равновесия жидкость-пар в металлах с учетом квантовых свойств электронов, а также при изучении гипотетического плазменного фазового перехода в водороде и дейтерии.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ БЫСТРЫХ ПРОЦЕССОВ В ГИДРОДИНАМИКЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ AMR

*Захаренков А.С.\* , Поварницын М.Е.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*strider@ihed.ras.ru*

Работа посвящена изучению динамики высокоскоростного пробивания экранов из различных материалов (свинец, алюминий, титан, цинк).

Как правило, взаимодействие ударника с мишенью является многостадийным процессом, в котором вещество может плавиться, испаряться, фрагментироваться и т. д., поэтому моделирование требует корректного описания фазовых переходов и динамики разрушения. Для этой цели каждое из рассматриваемых веществ описывается многофазным широкодиапазонным уравнением состояния, а фрагментация при отрицательных давлениях моделируется с помощью критерия, который согласован с уравнением состояния по давлению на спинодали. Также в процессе высокоскоростного удара возникают большие градиенты скорости, давления, плотности, вследствие чего моделирование на равномерной сетке часто оказывается неэффективным.

В данной работе проведено моделирование процесса высокоскоростного удара с помощью многокомпонентного метода Годунова второго порядка точности на эйлеровой сетке, интегрированного с пакетом Chombo, обеспечивающим построение и поддержание иерархии вложенных адаптивных сеток и автоматическое распределение вычислений при запуске на многопроцессорных кластерах. Также было проведено аналогичное моделирование без AMR с тем же пространственным и временным разрешением. Сопоставление результатов показывает значительный выигрыш во времени счёта и экономии вычислительных ресурсов при использовании адаптивных сеток.

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ГОДУНОВА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАЗРЫВНЫХ МГД-ТЕЧЕНИЙ

*Можарова Т.С.\* , Левашов П.Р., Поварницын М.Е.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*tmozharova@gmail.com*

Уравнения магнитной гидродинамики (МГД) возникают при решении многих фундаментальных и прикладных задач современной физики, техники, энергетики. Поэтому актуальной является задача создания численного кода, позволяющего моделировать самые разные процессы, описываемые системой МГД-уравнений.

Существует много численных методов для решения системы МГД-уравнений. Благодаря своей надежности и возможности хорошо воспроизводить разрывы метод Годунова и его производные приобретают все большую популярность для решения газодинамических уравнений. В последние десятилетия метод Годунова применяется и для решения МГД-уравнений.

Метод Годунова основан на точном или приближенном решении задачи Римана. Точное решение задачи Римана обычно слишком трудоемко, а в случае МГД имеет и очень сложную структуру. Поэтому широкое применение находят приближенные методы решения.

В докладе рассматриваются приближенный метод решения задачи Римана, предложенный Хартемом и др. [1], — метод HLL и уточненный метод HLLC, предложенный Торо и др. [2]. Метод HLL учитывает два основных разрыва, которые описывают распространение сильных особенностей типа ударных волн и не рассматривает разрывы типа контактных и тангенциальных; в методе HLLC производится дополнительный учет центрального (контактного) разрыва.

С помощью метода HLLC решается задача о распаде произвольного МГД-разрыва. Решаемые уравнения — уравнения идеальной МГД, в которой рассматриваются газовые среды с бесконечной проводимостью и не учитываются диссипативные процессы.

Для достижения второго порядка точности по времени используется процедура предиктор-корректор [3], по пространству — кусочно-линейное распределение функций внутри ячеек.

В отличие от газодинамических, которые в одномерном случае имеют три характеристики, МГД-уравнения содержат семь характеристик. Соответственно, значительно увеличивается количество типов возможных разрывов, реализующихся в МГД-течениях. Показано, что метод HLLC хорошо описывает все возможные виды МГД-разрывов.

В дальнейшем написанный код будет обобщен на многомерный случай с учетом несколько веществ и диссипативных процессов.

1. Harten A., Lax P.D., van Leer B. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws // SIAM Review (1983) 25:35-61.
2. Toro E.F., Spruce M., Speares W. Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver // Shock Waves (1994) 4:25-34.
3. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений // М.: Физматлит, 2001.

## ФЛУКТУАЦИОННЫЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

*Ланкин А.В., Норман Г.Э.\**

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*norman@ihed.ras.ru*

Рассмотрено самосогласованное описание свободных и связанных состояний электронов в неидеальной плазме. С этой целью развит флуктуационный подход к изучению области спектра, промежуточной между дискретными и непрерывными уровнями энергии. Введено представление о парных флуктуациях как о состояниях, промежуточных между низколежащими возбужденными состояниями атомов и свободными состояниями электронов. Предложенный подход преодолевает искусственный разрыв в описании электронных состояний на границе ионизации: парных электрон-ионных состояний для отрицательных энергий и коллективных состояний системы свободных электронов для положительных энергий. В рамках такого подхода с помощью метода молекулярной динамики получены следующие результаты.

Показано, что в неидеальной плазме наблюдается ограничение вклада в статистическую сумму парных флуктуаций, аналогичных возбужденным атомам. Плотность распределения этих флуктуаций по энергиям при малых энергиях связи  $\epsilon$  быстро уменьшается. Существует область энергий, примыкающая к границе ионизации, где парные флуктуации практически отсутствуют. В то же время дебаевское приближение дает конечное, а приближение Планка–Ларкина – расходящееся, как  $|\epsilon|^{-1/2}$ , значения плотности состояний вблизи границы ионизации, т.е. не обеспечивают адекватного описания вкладов флуктуаций типа слабосвязанных пар в области малых энергий связи. В области больших энергий связи результаты моделирования согласуются с распределением по энергиям в кулоновском поле, что подтверждает корректность модели.

Отмечена корреляция между значением энергии, ограничивающей энергетический спектр парных флуктуаций, и средним расстоянием между ионами, а также ограничением, обусловленным резонансным совпадением плазменной частоты и частоты обращения электрона в плазме.

Выяснено, что зависимости доли парных флуктуаций от общего числа электронов и скорости возникновения пар от степени неидеальности плазмы имеют максимум при  $\Gamma \approx 0.6 - 0.8$ .

Найдено распределение парных флуктуаций по временам жизни. Среднее время жизни парных флуктуаций в сильнонеидеальной плазме монотонно уменьшается с ростом степени неидеальности. И, наоборот, при уменьшении степени неидеальности время жизни парных флуктуаций начинает резко возрастать в области  $N_D \approx 1$ . Граница между атомами и флуктуациями определяется величиной штарковского уширения атомных уровней. Рассмотрен переход парных флуктуаций в пределе малых степеней неидеальности плазмы в возбужденные атомы. Оцениваются области существования возбужденных атомов и парных флуктуаций.

Рассмотрено распределение электронов по энергии и получены указания на наличие в нем мягкой щели. Установлено, что свободные электроны характеризуются максвелловским распределением, начало которого не смещается в отрицательную область энергий при любых значениях степени неидеальности плазмы. Подтверждено, что перекрытие кулоновских ям соседних электронов ведёт к формированию области многочастичных флуктуаций.

Скорость столкновительной рекомбинации, рассчитанная с использованием данной модели для разных  $Z$ , согласуется со скоростью трехчастичной рекомбинации в области малых степеней неидеальности плазмы, что подтверждает достоверность модели. При высоких степенях неидеальности результаты расчета предсказывают существенно меньшую скорость столкновительной рекомбинации, чем дает приближение идеальной плазмы. Скорость рекомбинации при высокой степени неидеальности плазмы начинает убывать с ростом неидеальности (для однозарядной плазмы это происходит при  $\Gamma > 0.9$ , при увеличении заряда иона максимум частоты рекомбинации смещается в область меньших  $\Gamma$ ).

Столкновительная рекомбинация в неидеальной многозарядной плазме подавляется с ростом заряда ионов и степени неидеальности плазмы. Механизм уменьшения частоты рекомбинации в сильно неидеальной плазме связан с возникновением щели в энергетическом спектре в области сильнонеидеальной плазмы.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕГРЕВНЫХ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ, РАЗВИВАЮЩИХСЯ В ПРОЦЕССЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВЗРЫВА ПРОВОДНИКОВ

*Орешкин В.И.\*, Русских А.Г., Чайковский С.А., Федущак В.Ф.*

*ИСЭ СО РАН, Томск*

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

В работе приводятся результаты экспериментальных и теоретических исследований процесса образования страт при электрическом взрыве тонких металлических проволочек. Для наблюдения страт использовалось мягкое рентгеновское излучение, образующееся в горячей точке X-пинча. Показано, что страты образуются в результате развития перегревных неустойчивостей. К возникновению перегревных неустойчивостей ведут три дестабилизирующих фактора: рост температуры в процессе взрыва; увеличение удельного сопротивления при росте температуры; увеличение удельного сопротивления при уменьшении плотности.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты № 06-02-72004, 08-08-90418).



## КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА В ВИГНЕРОВСКОМ И ТОМОГРАФИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИЯХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И РАСЧЕТ ПРОВОДИМОСТИ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЫ

*Левашов П.Р.\*<sup>1</sup>, Филлинов В.С.<sup>1</sup>, Бонич М.<sup>2</sup>, Фортос В.Е.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>Университет Киль, Киль, Германия

\*pasha@ihed.ras.ru

В работе представлены попытки построения численных методов для описания эволюции квантовых систем. Рассмотрены два представления квантовой механики: вигнеровское [1] и томографическое [2]. Анализируются достоинства и недостатки обоих подходов, демонстрируются результаты решения тестовых задач. На основе вигнеровской формулировки квантовой механики проведены расчеты проводимости водородной плазмы. Метод расчета сформулирован в работе [1] и состоит в решении эволюционного уравнения для функции Вигнера-Лиувилля методом характеристик; при этом учитывается только первый член итерационного ряда для функции Вигнера. Начальные условия для уравнений движения (характеристик) получаются в результате равновесного моделирования квантовым методом Монте-Карло. Результатом расчета является автокоррелятор скорость-скорость, который входит в формулу Кубо-Грина для коэффициента электропроводности. При этом по сравнению с предыдущей версией метода [1] с помощью томографического преобразования [2] удалось значительно упростить процедуру расчета. Моделирование проводилось в широком диапазоне плотностей при температурах выше  $10^4$  К. Результаты сравниваются с известными аналитическими выражениями для проводимости, а также с доступными экспериментальными данными.

1. Filinov V.S. Mol. Phys. 88, 1517 (1996)
2. S. Mancini, V.I. Man'ko, P. Tombesi, Found. Phys. 27, 801 (1997)

## УСТОЙЧИВОСТЬ ТВЕРДОГО ТЕЛА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ

*Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва

stegailov@ihed.ras.ru

В экспериментах по изучению воздействия на вещество фемтосекундных лазерных импульсов, одиночных тяжелых ионов и сверхмощных ультракоротких импульсов тока энерговклад передается в электронную подсистему твердой фазы. В результате начальный этап релаксации соответствует двухтемпературной среде с холодной решеткой и горячей электронной компонентой, электрон-фононная релаксация в которой проходит за времена порядка пикосекунд. Высокая температура электронной подсистемы приводит к изменению межатомного взаимодействия в твердой фазе, в результате чего изменяются свойства кристаллической решетки. Так, например, наблюдающийся при этом переход в разупорядоченную фазу получил название нетермического плавления, т.е. плавления в результате существенного изменения сил, действующих на атомы, а не изменению термодинамических параметров.

Методы *ab initio* молекулярной динамики основаны на выбранном методе расчета электронной структуры. Широкое распространение получил метод функционала электронной плотности Кона-Шэма, согласно которому энергия электронной подсистемы есть функционал электронной плотности  $E[n(\mathbf{r})]$ , а энергия основного состояния ( $T = 0$ ) соответствует минимуму этого функционала  $\min_{n(\mathbf{r})} E[n(\mathbf{r})]$ . Описание возбужденных состояний, а тем более переходов между состояниями, является нетривиальной задачей в рамках данного подхода. Для описания ненулевых температур был предложен метод, основанный на минимизации функционала свободной энергии  $F[n(\mathbf{r})]$ . В данном случае заселенность возбужденных состояний описывается на основе статистики Ферми-Дирака и при этом предполагается, что время установления равновесного распределения электронов много меньше характерных времен атомной динамики. С использованием данного подхода в работе анализируется устойчивость кристаллических решеток металлов при различных температурах электронной подсистемы.

## ЭВОЛЮЦИЯ СОСТАВА И СТРУКТУРЫ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПОТОКА, СОДЕРЖАЩЕГО ЧАСТИЦЫ, В ПРОЦЕССЕ НАНЕСЕНИЯ ПОКРЫТИЙ ПЛАЗМЕННО-КЛАСТЕРНЫМ МЕТОДОМ

*Храпач И.Н.\* , Ризаханов Р.Н., Полянский М.Н*

ФГУП «Исследовательский центр имени М. В. Келдыша», Москва

\*hrapach\_ivan@mail.ru

В настоящее время получают распространение технологии формирования покрытий путем осаждения на подложку частиц вещества из двухфазных потоков. Как показывает анализ публикаций по этой проблеме, в промышленных технологиях используются, как правило, неоптимальные методы решения задач и далекие от совершенства средства их реализации. Зачастую не ясен перечень явлений играющих основную роль в рабочих агрегатах. В данной работе рассматривается вопрос об оптимизации рабочих процессов на примере технологии плазменно-кластерного нанесения покрытий. Суть последней состоит в следующем.

В рабочую часть электродугового плазмотрона подается несущий газ с частицами порошка микронного масштаба. Несущий газ, проходя через сужение канала, разогревается дугой мощности порядка 10 кВт, после чего ускоряется в сверхзвуковой части плазмотрона и выводится в вакуумную камеру. Частицы порошка значительно отстают как по температуре, так и по скорости. С частицами могут происходить разнообразные изменения, такие, например, как плавление, испарение и последующая кластеризация. Размер, скорость и состояние частиц, выпадающих на подложку, определяют свойства покрытия. Поэтому технологическая задача оптимизации метода плазменно-кластерного напыления требует решения следующих физических задач: расчета газового потока и его взаимодействия с частицами, исследование столкновений частиц с подложкой, определение свойств покрытия в зависимости от результата взаимодействия частиц с подложкой.

В данной работе рассматриваются подходы к решению первой задачи. На основании экспериментальных данных делаются выводы о правомерности выбранного подхода. Задача ставится следующим образом. В канал с заданной геометрией подается несущий газ с известным массовым расходом, температурой и давлением. Известен также расход и сорт порошка. В критическом сечении канала горит дуга с заданными напряжением и силой тока. Струя газа с частицами истекает в среду с заданным давлением. Необходимо в каждом сечении определить температуру и скорость газа, температуру, скорость и фазовый состав частиц.

Постановка задачи в такой форме не определяет однозначно структуру потока как в заданном сечении, так и по длине канала. Особенность горения дуги в плазмотроне установки плазменно-кластерного напыления (горение в критическом сечении) дает основание предполагать, что могут сосуществовать два потока газа с существенно различными характеристиками – поток, прошедший сквозь дугу, и поток, ее миновавший. Но такая конфигурация может быть неустойчивой. В рамках работы этот вопрос обсуждается с учетом влияния диссоциации несущего газа.

**ДИНАМИКА ЭЛЕКТРОННОГО СГУСТКА В КИЛЬВАТЕРНОЙ ВОЛНЕ, ГЕНЕРИРУЕМОЙ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ, С УЧЕТОМ САМОВОЗДЕЙСТВИЯ ЕГО СОБСТВЕННОГО ЗАРЯДА**

*Андреев Н.Е., Кузнецов С.В.\**

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*shenau@rambler.ru*

Перспективы в развитии метода лазерно-плазменного ускорения электронов с помощью кильватерной волны, генерируемой коротким лазерным импульсом, во многом зависят от возможности ускорять электронные сгустки достаточно большого заряда до ультрарелятивистских энергий при условии малого энергетического разброса электронов сгустка. Для многих приложений, в которых используются высокоэнергичные сгустки электронов, важным требованием к характеристикам ускоренного электронного сгустка является его моноэнергетичность 1% и менее.

Неоднородность сравнительно короткого кильватерного поля, генерируемого лазерным импульсом, приводит к увеличению энергетического разброса электронов сгустка, причем задние электроны сгустка приобретают большую энергию, чем передние. В то же время, самовоздействие электронов, вызываемое полем собственного заряда сгустка, может оказывать противоположное влияние на энергетический разброс в сгустке. Таким образом, возникает возможность минимизировать разброс по энергии в ускоренном сгустке при учете его заряда.

С целью достижения требуемых характеристик ускоренного сгустка проведено аналитически и посредством численного моделирования исследование процесса лазерно-плазменного ускорения релятивистского электронного сгустка конечного заряда в кильватерной волне, возбуждаемой в плазме коротким интенсивным лазерным импульсом. Рассмотрены различные схемы инжекции сгустка в ускоряющую кильватерную волну. Показано, что при инжекции достаточно короткого электронного сгустка с такой энергией, что их скорость больше фазовой скорости кильватерной волны, существует оптимальное значение заряда сгустка, при котором разброс по энергии в ускоренном электронном сгустке имеет минимальное значение. Для одномерного случая определена аналитическая зависимость величины оптимального заряда сгустка от параметров кильватерного поля и условий инжекции. С помощью численного моделирования кодом LAPLAC, учитывающего как нелинейную трехмерную динамику лазерного импульса, так и самосогласованную генерацию кильватерных плазменных полей, исследовано влияние самовоздействия сгустка на динамику его ускорения при инжекции сгустка в лазерно-плазменную систему перед фронтом лазерного импульса, генерирующего ускоряющую кильватерную волну. В этом случае захват электронов в кильватерную волну происходит при условии, что их скорость инжекции меньше скорости кильватерной волны. Показано, что собственный заряд сгустка может улучшать характеристики ускоренных электронов, в частности, значительно уменьшая эмиттанс сгустка за счет его самофокусировки в плазме под действием собственных кильватерных полей.

Работа выполнена при частичной поддержке Российским фондом фундаментальных исследований, грант (РФФИ №07-02-92160-НЦНИ а) и Программами фундаментальных исследований РАН.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ДЕФОРМАЦИЙ В ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ**

*Ашитков С.И.<sup>\*1</sup>, Агранат М.Б.<sup>1</sup>, Анисимов С.И.<sup>2</sup>, Жаховский В.В.<sup>1</sup>, Иногамов Н.А.<sup>2</sup>,  
Каменев В.Г.<sup>1</sup>, Комаров П.С.<sup>1</sup>, Нишихара К.<sup>3</sup>, Овчинников А.В.<sup>1</sup>, Петров Ю.В.<sup>2</sup>,  
Ситников Д.С.<sup>1</sup>, Хохлов В.А.<sup>2</sup>*

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

\*ashitkov11@yandex.ru

Особенностью воздействия фемтосекундных лазерных импульсов умеренной интенсивности  $10^{13} - 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup> на металлы является возникновение мощных термомеханических напряжений в поверхностном слое мишени, приводящих к формированию ударной волны, распространяющейся вглубь мишени и абляции материала на нагреваемой поверхности образца. Поглощение излучения данной интенсивности в скин-слое толщиной порядка  $10^{-7}$  см приводит к нагреву электронов проводимости в течение действия импульса до температур порядка нескольких электрон вольт. Далее энергия распространяется вглубь мишени вследствие электронной теплопроводности, а также передается в решетку в результате процесса электрон-фононного теплообмена.

В настоящей работе для алюминиевой мишени приведены результаты расчета динамики формирования профиля ударной волны с помощью двухтемпературного гидродинамического кода [1]. Согласно результатам расчетов, воздействие на алюминиевую мишень лазерного импульса длительностью 100 фс с плотностью энергии 2 Дж/см<sup>2</sup> приводит к формированию слоя толщиной 100 нм, нагретого до температур в несколько тысяч градусов с давлением 20 ГПа. Это происходит за временной промежуток порядка времени выравнивания температур электронной и ионной подсистем. В толщу мишени распространяется возмущение из волны сжатия и волны разрежения. Волна сжатия начинается с ударной волны. При удалении ударной волны на 0,7 мкм толщина волны сжатия составляет 0,3 мкм. Результаты молекулярно-динамического моделирования показывают, что при отражении ударной волны от свободной поверхности мишени образуется откольный слой толщиной порядка 0.1-0.2 мкм. На поверхности мишени, нагреваемой лазерным излучением, при данных интенсивностях имеет место плавление и абляция поверхностного слоя вещества. Характерные скорости при этом составляют порядка 0.1-1 км/с.

С помощью фемтосекундной микроинтерферометрии [2] получены количественные данные о высокоскоростном деформировании нагреваемой и обратной поверхностей тонких металлических пленок толщиной 1 мкм под действием фемтосекундных лазерных импульсов с интенсивностью  $10^{13} - 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup>. Приводится сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов.

1. Anisimov S.I., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Khokhlov V.A., Zhakhovskii V.V., Nishihara K., Agranat M.B., Ashitkov S.I., Ovchinnikov A.V., Komarov P.S. //9th Annual Conference on Laser Ablation COLA 2007, September 24-28, 2007, Tenerife, Spain Technical Program, Report PМО-36, page 62.
2. Агранат М.Б., Андреев Н.Е., Ашитков С.И., Вейсман М.Е., Левашов П.Р., Овчинников А.В., Ситников Д. С., Фортвов В.Е., Хищенко К. В., // Письма в ЖЭТФ, Том 85, № 6 стр. 328, 2007

**СПЕКТРЫ МНОГОЗАРЯДНЫХ ПОЛЫХ ИОНОВ В РЕНТГЕНОВСКОМ ИЗЛУЧЕНИИ ПЛОТНОЙ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ**

*Скобелев И.Ю.\*, Пикуз Т.А., Фаенов А.Я.*

ОИВТ РАН, Москва

\*skobelev@ihed.ras.ru

Рентгеновские спектры излучения нано- и субнаносекундной лазерной плазмы интенсивно исследовались на протяжении более чем 30 последних лет. В частности, к настоящему времени очень подробно изучены спектральные характеристики излучения в окрестности резонансных линий Н-подобных и Не-подобных многозарядных ионов. Спектры в этой области имеют типичную структуру, характеризующую присутствием сателлитных линий, которая хорошо описывается радиационно-столкновительными кинетическими моделями. Эксперименты, проведенные с плазмой, создаваемой пико- и субпикосекундными лазерами сверхвысокого контраста, позволили зарегистрировать спектры нового типа, не наблюдавшихся ранее в этой спектральной области.

Наблюдаемые “необычные” спектры отличаются наличием сложной спектральной структуры квазинепрерывного характера, в которую погружаются основные линии. В настоящей работе дан обзор наблюдений такого нового типа эмиссионных спектров, полученных для различных мишеней (твердотельные Si и Mg, кластеры N и Ar) и параметров лазерного импульса. Показано, что эти спектры связаны с радиационными переходами в многозарядных полых ионах (т.е. в ионах с пустой К-оболочкой) в плазме высокой плотности.

Приведены результаты моделирования спектров многозарядных полых ионов и обсуждается возможность их использования для диагностики лазерной плазмы.

Работа поддержана грантом РФФИ 06-02-72005-МНТИ-а.

# ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНО-УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ БЫСТРЫХ ПРОТОНОВ С ТЫЛЬНОЙ СТОРОНЫ МИШЕНИ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ НА УСТАНОВКЕ СОКОЛ-П ПРИ ПЛОТНОСТИ ПОТОКА ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПОРЯДКА $10^{19}$ Вт/см<sup>2</sup>

*Чефонов О.В.\*<sup>1</sup>, Андрияш А. В.<sup>2</sup>, Вихляев Д. А.<sup>2</sup>, Гаврилов Д. С.<sup>2</sup>, Горохов С. А.<sup>2</sup>, Дмитров Д. А.<sup>2</sup>, Запысов А. Л.<sup>2</sup>, Какшин А. Г.<sup>2</sup>, Капустин И. А.<sup>2</sup>, Лобода Е. А.<sup>2</sup>, Лыков В. А.<sup>2</sup>, Потапов А. В.<sup>2</sup>, Пронин В. А.<sup>2</sup>, Санжин В. Н.<sup>2</sup>, Сапрыкин В. Н.<sup>2</sup>, Сафронов К. В.<sup>2</sup>, Толстоухов П. А.<sup>2</sup>, Угоденко А. А.<sup>2</sup>, Чижков М. Н.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, <sup>2</sup>РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск

\*oleg.chefonov@gmail.com

С развитием мощных лазеров с ультракороткой длительностью импульса ( $\sim 1$  пс и менее) стало возможным изучение взаимодействия лазерного излучения с веществом в новом режиме при интенсивностях  $\sim 10^{18}$  Вт/см<sup>2</sup> и выше. В последнее время частым предметом экспериментального и теоретического исследования является генерация пучков ускоренных протонов и ионов при облучении тонких металлических мишеней ультракороткими лазерными импульсами высокой интенсивности. Уникальные параметры получаемых протонных пучков (высокая яркость, малый эмиттанс, длительность источника, сравнимая с длительностью лазерного импульса) стимулируют развитие перспективных направлений практического использования лазерно-плазменных источников ионов в науке и медицине [1-4].

В данной работе мы представляем результаты экспериментов по исследованию спектрально-углового распределения протонов ускоренных с тыльной стороны мишени. Эксперименты проведены на 10-тераваттной пикосекундной лазерной установке СОКОЛ-П [5] при плотности потока лазерного излучения на мишени до  $10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup>.

1. Fritzier S., Malka V., Lefebvre E. et al. Proton beams generated with high-intensity lasers: Applications to medical isotope production // Applied Physics Letters, 2003. v.83. N15. P. 3039-3041.
2. Cowan T. et al. Ultralow emittance multi-MeV proton beams from a laser virtual-cathode plasma accelerator // Phys. Rev. Lett., 2004. v.92. P. 204801.
3. Ledingham K., McKenna P. and Singhal R. P. Applications for nuclear phenomena generated by ultra-intense lasers // Sci-ence, 2003. v.300. P. 1107-1111.
4. Bulanov S. and Khoroshkov V. Feasibility of using laser ion accelerators in proton therapy // Plasma Phys. Rep., 2002. v. 28. P. 453-456.
5. Dmitrov D. A., Fomichev L. A., Kakshin A. G. et al. 10 – TW Picosecond Nd: glass Laser Facility “Sokol – P” // XXVIII ECLIM, Conference Proceedings, 2004.

## АБСОРБЦИОННАЯ И ФАЗОВО-КОНТРАСТНАЯ РАДИОГРАФИЯ МИКРО И НАНООБЪЕКТОВ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ИЗЛУЧЕНИИ ФЕМТОСЕКУНДНОЙ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ

*Гасилов С. В.\* , Пикуз Т. А., Скобелев И. Ю., Фаенов А. Я.*

ОИВТ РАН, Москва

\*sergei.gasilov@gmail.com

Хорошо известно, что с помощью традиционной абсорбционной радиографии невозможно исследовать структуру предметов, состоящих из материалов с низкими атомными номерами или толщиной порядка одного микрометра. Такие объекты практически полностью прозрачны для жесткого рентгеновского излучения, которое обычно используется для освещения исследуемых объектов. Например, контраст изображения парилоновой пленки толщиной 100 нм, полученной при освещении излучением с длиной волны 1 Å будет равен нулю, из-за пренебрежимо малого поглощения излучения в различных частях образца. Для исследования подобных объектов с помощью источников жесткого рентгеновского излучения были разработаны методы фазового-контраста [1]. Однако, для практической реализации этих методов необходимы рентгеновские источники с высокой степенью пространственной или временной когерентности, например, синхротронные источники.

В данной работе для исследования нанообъектов предлагается использование мягкого рентгеновского излучения с длинами волн  $\sim 10$  Å, которое значительно эффективнее взаимодействует с веществом, чем жесткое рентгеновское излучения. В качестве источника мягкого рентгеновского излучения (МРИ) в работе использовалась плазма, создаваемая при взаимодействии лазерных импульсов длительностью от 60 фс до 1 пс и энергией 120 мДж с твердотельными мишенями. Для описания источника мягкого рентгеновского и вакуумного ультрафиолетового излучения на основе фемтосекундной лазерной плазмы (ФЛП источник) были экспериментально измерены спектр рентгеновского излучения, яркость и размер источника. Показано, что при нагреве тефлоновой мишени импульсами низкого контраста длительностью 1 пс и энергией 100 мДж обеспечивается эффективное преобразование лазерного излучения в мягкое рентгеновское излучение в диапазоне длин волн от 10 до 40 Å с коэффициентом конверсии 1%.

ФЛП источник применялся для абсорбционной радиографии нанополенок с толщиной от нескольких нанометров до нескольких микрометров. В качестве детектора МРИ применялись кристаллы фторида лития [2]. Полученные изображения имеют субмикронное пространственное разрешение на большом поле зрения и позволяют различить вариации в толщине объекта  $\sim 1$  нм для материалов типа Cu, Fe, Al. Нанополенки, состоящие из легких материалов (C, F), прозрачны даже для МРИ. В этом случае контраст изображений может быть улучшен в несколько раз за счет распространительного фазового контраста. Его реализация возможна поскольку ФЛП является пространственно когерентным источником в исследуемой оптической системе.

1. Paganin D. M. Coherent X-ray Optics. - Oxford University Press, 2006.
2. Baldacchini G., Bollanti S., Bonfigli F., et al. //Rev. Sci. Instrum. 2005. V. 76, 113104.

## РАЗРУШЕНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ПОТОКА ЭЛЕКТРОНОВ

*Ефремов В.П.<sup>\*1</sup>, Демидов Б.А.<sup>2</sup>, Петров В.А.<sup>2</sup>, Мещеряков Р.Н.<sup>1</sup>, Потапенко А.И.<sup>3</sup>, Михайлова Л.И.<sup>3</sup>, Грибанов В.М.<sup>3</sup>, Метелкин С.Ю.<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, <sup>2</sup>РНЦ КИ, Москва, <sup>3</sup>12 ЦНИИ МО РФ, Сергиев Посад

*\*efremov@ihed.ras.ru*

Изучена динамика разрушения простых и составных мишеней из эпоксидной смолы, ПММА и полистирола при облучении импульсным потоком электронов (с энергией 0,3 МэВ и током пучка 20 кА и временем воздействия 100 нс). Все облучаемые мишени были прозрачными, что позволяло регистрировать их разрушение двумя высокоскоростными камерами «Наноскан». Образец подсвечивался пятью лазерными лучами с расстоянием между ними 2,5 мм. Диаметр области взаимодействия электронного пучка с полимерами определялся по тормозному рентгеновскому излучению с помощью камеры обскуры. Определены скорость фронта ударной волны и скорость фронта зоны разрушения (зоны образования трещин). Обнаружена существенная разница в характере объемного разрушения исследуемых материалов. В полистироле разрушение мишени, образование трещин, сколов и т. д. начинается сразу же из зоны поглощения электронного пучка и распространяется в глубь мишени. В ПММА и эпоксидной смоле необратимые явления в виде трещин и сколов возникают в глубине мишени на расстоянии 3..5 мм от зоны энерговыделения. Расчетные исследования проведены с использованием трехмерных численных методик. Определено распределение поглощенной энергии пучка и объемного заряда в преграде. Исследована динамика волн напряжений и образования разрушений. Получено удовлетворительное согласие с результатами экспериментов.

## ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ИЗДЕЛИЯХ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ РАДИАЦИОННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

*Данилов В.П., Ульяновков Р.В., Слободчиков С.С., Потапенко А.И.\**

12 ЦНИИ МО РФ, Сергиев Посад

*\*a.potapenko@mail.ru*

На работоспособность радиоэлектронных изделий существенное влияние оказывает воздействие внешних ионизирующих излучений естественного и искусственного происхождения. Основные источники этих излучений – космическое пространство и ядерные энергетические установки. Их воздействие может приводить к необратимым и обратимым нарушениям работоспособности, вызванным радиационными, ионизационными и термомеханическими эффектами. Исследование последних в последнее время является актуальной задачей в связи с миниатюризацией элементов и узлов электронной аппаратуры, усложнением схмотехнических решений, высокими градиентами концентрации примесей.

В работе проводится анализ термомеханических эффектов, возникающих при действии импульсного излучения в некоторых изделиях микроэлектроники. Численно исследованы механизмы отказов, связанные с возможным нарушением целостности корпуса микросхем и повреждением активных областей.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГОМОГЕНИЗАЦИИ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ ПРИ ДЕЙСТВИИ ИНТЕНСИВНОГО ПОТОКА ИЗЛУЧЕНИЯ

*Ефремов В.П.<sup>\*1</sup>, Потапенко А.И.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, <sup>2</sup>12 ЦНИИ МО РФ, Сергиев Посад

*\*efremov@ihed.ras.ru*

Пористые среды находят многочисленные применения в фундаментальных и прикладных исследованиях (для конверсии излучения, создания интенсивных радиационных тепловых волн и т.д.). Современная точка зрения диктует прямой переход из пористой среды в однородную плазму. Однако это упрощение может оказаться неверным для быстрого нагрева, когда схлопывание пор создает достаточно быстрые гидродинамические течения. Эти течения за счет охлаждения части вещества кумулируют энергию внутри пор приводя к более высоким плотностям энергии.

Прямое исследование схлопывания пор затруднительно из-за нерегулярной формы пор и малого времени схлопывания. В работах [1,2] использована схема физического моделирования, включающая две или более тонких параллельных фольг, моделирующих стенки пор. Нагрев в результате энерговыделения пучка приводил к нагреву, испарению и расширению фольг. Исследовался режим одномерного схлопывания в центре.

Для моделирования результатов [1,2] использован одномерный численный код. Проведен анализ температуры и плотности в зоне столкновения потоков для различных вариантов расположения фольг. Экспериментально и численно показано, что зона столкновения много ярче, чем фольги во время облучения. Это может доказывать существование “горячих точек” в облученных пористых средах.

1. V. Efremov, B. Demidov, A. Mescheryakov, A. Potapenko, V. Fortov Physical modeling of porous media behavior in targets for inertial fusion // Nuclear Instruments and methods in Physics Research A 577 (2007), p. 324-326.
2. A. Bugrov, I. Burdonskiy, V. Gavrilov, A. Gol'tsov, E. Grabovskiy, V. Efremov, E. Zhuzhukalo, M. Zurin, N. Koval'skiy, V. Kondrashov, G. Oleinik, A. Potapenko, A. Samokhin, V. Smirnov, V. Fortov and I. Frolov Experimental and theoretical studies of the physical processes occurring in thin plane targets irradiated by intense X-ray pulses // Plasma Physics Reports, Vol. 33, No. 6. (June 2007), p. 444-454.

## **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕАКЦИИ ПЗС ЛИНЕЙКИ КАМЕРЫ «SONY» НА ВОЗДЕЙСТВИЕ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ**

*Петровский В.П.\* , Агранат М.Б., Овчинников А.В.*

*ОИВТ РАН, Москва*

*\*Petrovsky@ihed.ras.ru*

Представлены экспериментальные результаты по изучению работоспособности ПЗС линейки камеры «SONY» при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов в режимах с энергией излучения ниже и на уровне порога абляции. Эксперименты выполнены на фемтосекундном лазерном комплексе ИТЭС. Для проведения исследований по установлению параметров излучения, приводящих к различным механизмам нарушения работоспособности ПЗС - линейки было использовано излучение фемтосекундной лазерной системы с активной средой титан-сапфир. Длина волны излучения лазерного импульса 800 нм, длительность 40-50фс, энергия 2.5мДж. Лазерная система работает с частотой 1кГц, а для реализации работы в режиме одиночного импульса используется прецизионная схема синхронизации лазерного комплекса с ПЗС - линейкой. Определение энергетических параметров фемтосекундного лазерного импульса, приводящих к абляции элемента ПЗС – линейки осуществлялось с помощью методики нагревающего и зондирующего импульсов, в которой нагревающий импульс воздействует непосредственно на элемент ПЗС - линейки, а с помощью зондирующего импульса измеряются изменения интенсивности отраженного сигнала после воздействия нагревающего импульса. В качестве нагревающего импульса использовалось излучение на длине волны 800нм, а зондирующего – 400нм. Длительность импульсов составляла 40фс. В результате проведенных экспериментальных исследований установлена реакция, механизм и параметры излучения, приводящие к временной, длительной и полной потере работоспособности ПЗС линейки камеры «SONY».

## **ОЦЕНКА НЕМАТЕРИАЛЬНЫХ АКТИВОВ ЛАБОРАТОРИИ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ КАК СТРУКТУРНОГО ПОДРАЗДЕЛЕНИЯ ИТЭС ОИВТ РАН**

*Петровская Е.В.\*<sup>1</sup>, Петровский В.П.<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>МФТИ, Долгопрудный, <sup>2</sup>ОИВТ РАН, Москва*

*\*armorf@armorf.ru*

В рамках настоящей работы предложен методологический подход к оценке рыночной стоимости нематериальных активов (НМА), создаваемых научным подразделением академического института с учётом специфики его деятельности – выполнение фундаментальных и прикладных исследований в области естественных наук. На основе анализа результатов исследований и детального изучения характера работы научного и инженерно-технического персонала лаборатории лазерного воздействия, обоснована структура главных и определяющих компонентов нематериальных активов, принадлежащих данному научному подразделению ИТЭС. Нематериальные активы лаборатории представляют собой совокупность: - научно – имиджевых активов (качество и результаты научных исследований, корпоративное имя ИТЭС ОИВТ РАН, портфели заказов, деловое сотрудничество); - интеллектуальная собственность (патенты, авторские права, единая технология, ноу-хау, производственные секреты, программы для ЭВМ, товарный знак ОИВТ РАН); - человеческий капитал (образование, профессиональная квалификация, связанные с работой знания, связанные с работой умения); - инфраструктурный капитал (корпоративная культура, управленческие процессы, информационные технологии, сетевые системы связи, отношения с финансовыми кругами). На основе предложенного подхода, детальной идентификации и инвентаризации нематериальных активов, принадлежащих научному коллективу и, соответственно, определяющих положение лаборатории на рынке научно-технической продукции, определена стоимость НМА, создаваемых и в научном подразделении ИТЭС, специализирующимся в области фундаментальных физических исследований процессов и явлений, возникающих при воздействии нано и фемто лазерных импульсов на вещество.

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ НАНОЖИДКОСТЕЙ. МИФЫ, ДОСТИЖЕНИЯ И ПРОБЛЕМЫ

*Рудяк В.Я.*

*БАРНЦ, Новосибирск*

*valery.rudyak@mail.ru*

Интерес к тематике, определяемой названием данного доклада, сформировался в начале 90-х годов прошлого столетия в связи с многочисленными приложениями, которые сегодня объединяются термином нанотехнологии. Однако вскоре стало ясно, что эта тематика имеет и важную фундаментальную составляющую. Оказалось, что процессы переноса наночастиц в газах и в жидкостях не удается описывать традиционными методами. И для адекватного понимания механизмов процессов переноса наночастиц необходим пересмотр некоторых сложившихся представлений о характере процессов переноса и в обычных молекулярных жидкостях.

В данном докладе дан обзор результатов, полученных автором и его группой по изучению процессов переноса наночастиц в газах и жидкостях. В частности, обсуждаются

- (i) характерные механизмы процессов переноса в наножидкостях;
- (ii) кинетическая теория наногазовзвесей;
- (iii) результаты молекулярно-динамического моделирования наножидкостей;
- (iv) результаты и проблемы моделирования течений жидкости в микроканалах.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы Минобрнауки РФ “Развитие научного потенциала высшей школы” (проект № 2.1.1.471), РФФИ (грант № 07-08-00164) и гранта № НШ-454.2008.1 поддержки ведущих научных школ.

РОСТ БЕЗДЕФЕКТНЫХ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЕВ ИЗ УГЛЕРОДНОГО ПАРА ПО МЕХАНИЗМУ ПАР-ЖИДКОСТЬ-КРИСТАЛЛ

*Башарин А.Ю.\* , Турчанинов М.А., Дождигов В.С., Лысенко И.Ю.*

*ОИВТ РАН, Москва*

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

Сравнивались условия роста углерода из пересыщенного пара на плоскости (001) высокосовершенного графита (НОРГ) при ре-испарении углеродного пара с давлением выше (11 МПа) и ниже (9 МПа) давления  $P_{TT}$  в тройной точке углерода кристалл-жидкость-пар. Углеродный пар получали испарением НОРГ импульсом лазера длительностью 1 мс в газостате, наполненном инертным газом. Атомистическая картина роста восстанавливалась по результатам наблюдения особенностей затвердевания углерода в виде первичного холмика роста на незарастающей ступени винтовой дислокации методами атомно-силовой микроскопии (АСМ). Множество таких дислокаций появлялись вследствие механического стресса, вызванного действием лазерного импульса.

Установлено, что механизм встраивания углеродных атомов в излом ростовой ступени холмика зависит от давления пара и степени его пересыщения. Так в условиях  $P < P_{TT}$  (механизм пар-кристалл (ПК)) излом остается “сухим”, а на ступени присутствуют множественные интерферирующие вторичные винтовые дислокации, декорированные атомами углерода, осажденными из пара. Дефектность полученных углеродных слоев характеризуется поверхностной плотностью дислокаций равной  $\sim 3 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-2}$ . В качестве причины появления дислокаций рассматривается изгиб графенового слоя при столкновении растущей ступени с твердой частицей, адсорбированной на террасе из пара.

В то же время при  $P > P_{TT}$ , несмотря на то, что в изломах ступеней и на террасах холмика видны затвердевшие жидкие капли, вторичные дислокации отсутствуют. Адсорбированная жидкая частица, по оценке, находится на террасе в жидком состоянии до столкновения с ростовым фронтом, что приводит к ее поглощению последним и терраса остается атомно – гладкой. Торец, смоченный жидкостью, присоединяет к себе практически каждый углеродный атом, соударяющийся со ступенью в районе излома (модель атомно-шероховатой жидкости). Это приводит к значительной анизотропии роста, такой, что скорость роста в тангенциальном направлении превышает нормальную более чем в 20 раз. Совершенная структура углеродных слоев, выращенных в соответствии с механизмом роста пар-жидкость-кристалл (ПЖК), подтверждена малой шириной G-линии в КР спектре на уровне значений для природного графита. Демонстрируются результаты АСМ исследования протяженных террас атомарной толщины и дендритных выростов толщиной в два графеновых слоя и линейными размерами  $\sim 20 \times 60$  нм.

По соотношению скоростей тангенциального роста по механизмам ПК и ПЖК оценен коэффициент эффективности использования жидкой фазы. Более чем 5-ти кратная величина коэффициента подтверждает достаточную эффективность ПЖК механизма. Это позволит в будущем перейти от линейных размеров атомно-гладких террас в десятки микрон, которые реализованы в настоящий момент, к размерам в сотни микрон, которые требуются для графена, состоящего из ограниченного числа (1-2) графеновых слоев - перспективного углеродного наноматериала с уникальными электронными свойствами, который, как предполагается, в будущем заменит кремний. Импульсные методы, примененные в настоящей работе, могут быть достаточно конкурентноспособными в этом случае, поскольку речь идет о получении материала, толщиной всего лишь в несколько атомных слоев.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы РАН, РФФИ (гранты № 07-08-00744-а, № 07-08-12170-офи) и программы У.М.Н.И.К.



## СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ $Me_xO_y$ ПРИ ОКИСЛЕНИИ МЕТАЛЛОВ СУБ- И СВЕРХКРИТИЧЕСКОЙ ВОДОЙ

Востриков А.А.<sup>1</sup>, Федяева О.Н.\*<sup>1</sup>, Сокол М.Я.<sup>1</sup>, Фадеева И.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ИТ СО РАН, Новосибирск-90, <sup>2</sup>НГУ, Новосибирск

\*fedyaeva@itp.nsc.ru

В докладе представлены результаты исследования механизмов и кинетики окисления алюминия, железа и циркония водой при суб- и сверхкритических параметрах (критические параметры воды:  $T_{cr} = 647.1$  К,  $P_{cr} = 22.1$  МПа). Установлено, что массивные образцы металлов  $\langle Me \rangle$  реагируют с молекулами воды при их достаточно высокой плотности с образованием наночастиц различной топологии. При этом массив  $\langle Me \rangle$  частично или полностью переходит в наночастицы  $(Me_xO_y)_n$ . Например, в зависимости от условий реализации процесса при окислении алюминия образуются наночастицы  $\gamma$ - $Al_2O_3$  размером до 50 нм и  $\alpha$ - $Al_2O_3$  размером до 500 нм, при неполном окислении формируются керметы. Переход  $\langle Me \rangle$  в  $(Me_xO_y)_n$  в суб- и сверхкритической воде назван нами химической переконденсацией (ХП) [1,2].

Поскольку реакции парного взаимодействия атомов Al, Fe, Zr с молекулами  $H_2O$  в газовой фазе, являются эндотермическими, то предполагается кластерный механизм ХП, когда при достаточно высокой плотности  $H_2O$  реализуются условия образования зародышей ХП без затрат энергии при многочастичном взаимодействии  $\langle Me \rangle + zH_2O = \langle Me \rangle (Me_xO_y)_{n*} + zH_2$ . При предполагаемом механизме лимитирующей стадией ХП является образование зародышей при многочастичном взаимодействии реагентов, так как дальнейший рост  $(Me_xO_y)_{n>n*}$  происходит при экзотермической реакции  $\langle Me \rangle (Me_xO_y)_{n>n*} + H_2O = \langle Me \rangle (Me_xO_y)_{n+1} + H_2$ . Эксперименты проведены в изотермическом (при вырыске СКВ в предварительно нагретый реактор с металлом) и в неизотермическом режимах (при нагреве реагентов в реакторе постоянного объема). В экспериментах измеряли давление, температуру, состав реагентов (масс-спектрометр МС-7303) и параметры синтезируемых образцов (просвечивающий электронный микроскоп высокого разрешения JEM-2010). Количество прореагировавшего металла определяли по приросту массы образцов после эксперимента. Кинетику процесса описывали, используя зависимости изменения количества молей водорода в реакторе (по изменению давления) от времени и от температуры. В результате получены глобальные кинетические уравнения процесса ХП для исследованных металлов.

Авторы благодарят В.И. Зайковского (Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН) за проведение электронно-микроскопического анализа образцов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант No 05-08-17982) и Президиума РАН (грант 8.10).

1. Востриков А.А., Шишкин А.В., Тимошенко Н.И. // Письма в ЖТФ. 2007. Т.33. №1. С.60.
2. Востриков А.А., Федяева О.Н., Шишкин А.В., Сокол М.Я. // Сверхкритические флюиды: теория и практика. 2007. Т.2. №4. С.43.

## НЕСТАЦИОНАРНОСТЬ РЕЖИМОВ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ ПРИ СОВМЕСТНОМ ВАКУУМНОМ ОСАЖДЕНИИ ДВУХ КОМПОНЕНТ ПАРА

Бочкарев А.А.\*, Полякова В.И.

ИТ СО РАН, Новосибирск

\*aboch@online.nsk.su

В 90-е годы авторы разработали технологию получения нано дисперсных композитов металл-органика вакуумным осаждением двух компонент пара на криогенном конденсаторе. Например, композит нано дисперсный цинк – бутанол после размораживания показывал высокую химическую и физическую активность благодаря малому размеру частиц цинка 10–1000 А. По виду это была вязкая жидкость чёрного цвета. Метастабильность жидкости проявлялась в периодическом «кипении» на открытом воздухе с медленным изменением цвета. При нанесении на стальную и даже ржавую стальную поверхность после высухания бутанола композит оставлял цинковое покрытие. Два разнородных электрода, помещенных в композит, показывали э.д.с. Электрическая ёмкость такого источника тока соответствовала окислению цинка кислородом воздуха. В те годы композиты не нашли широкого применения. Сейчас, когда нано технологии провозглашены актуальными, появилась надежда, что нано дисперсные композиты найдут применение.

При производстве нано композитов авторы удивляли два обстоятельства. Во-первых, авторы не могли обеспечить длительный стабильный режим процесса. Требовалось непрерывное регулирование для получения стабильного продукта. Во-вторых, даже при подаче малого содержания паров металла в сравнении с парами органики в конечном продукте оказывалась высокая концентрация металла. Поэтому, с дальней целью реанимировать и продолжить работы по нано композитам, авторы предприняли математическое моделирование конденсации двухкомпонентного пара на криогенной поверхности. Для построения модели сорбции, нуклеации и конденсации была использована модель Ленгмюра, модифицированная Е.И. Гиваргизовым с коллегами [1]. Моделировалась конденсация смеси паров воды и серебра на поверхности с температурой 223К. Результаты расчётов показали ряд новых неожиданных явлений.

1. Имеет место взаимная стимуляция нуклеации островков конденсированной фазы компонентов.
2. Стационарные режимы конденсации двухкомпонентного пара отсутствуют. Состав нано дисперсного конденсата непрерывно меняется с ростом толщины слоя конденсата на подложке.
3. Имеются определённые ограничения на состав смеси двух паров для получения нано композитов. При малых концентрациях паров серебра режим стремится к конденсации чистой воды, при больших концентрациях режим стремится к конденсации чистого серебра.

Обнаруженные в расчётах явления проясняют странное поведение реального процесса конденсации смеси паров, наблюдавшееся авторами ранее при производстве композитов. Результаты моделирования позволяют по-новому взглянуть на эти процессы и конструировать технологию на новом уровне понимания.

1. Чернов А.А., Гиваргизов Е.И., Багдасаров Х.С., Демьянец Л.Н., Кузнецов В.А., Лобачев А.Н. Современная кристаллография. 3 том. Образование кристаллов. – М.: Наука, 1980. 407 с.

## РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В НАНОКРИСТАЛЛАХ

*Копцева А.А.*

*НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик*

*sv\_karpenko@mail.ru*

Изучение наноразмерных объектов является актуальной задачей современной физики, так как свойства наноразмерных кластеров существенным образом отличаются как от кристаллического так и от аморфного состояния вещества. Несмотря на значительные успехи в области нанотехнологий, в большинстве существующих теоретических моделей принимается, что основные динамические, термодинамические и механические характеристики нанобъектов совпадают со своими значениями, полученными из экспериментов с массивными материалами. Однако, для структур, содержащих всего несколько слоев атомов, не может не сказываться противоречие между очевидной дискретностью объекта и непрерывностью метода его описания.

Существенные изменения свойств наночастиц ионных диэлектриков, обусловленные физическими особенностями отдельных частиц, происходят при уменьшении размеров последних до  $r \leq 100$  нм [1].

Структура наночастиц ионных диэлектриков качественно отлична от структуры соответствующих массивных материалов. На нижнем пределе размеров частиц структура изучена относительно мало, но есть основания полагать, что она близка структурам с ближним порядком, характерным для жидких и аморфных тел. Вследствие влияния поверхностной энергии изменяются термодинамические условия фазовых равновесий. С уменьшением размера частицы при переходе от массивного состояния к наноразмерам возрастает вклад поверхности в свободную энергию, а, следовательно, необходимо учитывать размерную зависимость поверхностной энергии. В существующих моделях поверхностная энергия вычисляется без учета размерной зависимости.

Учет размерной зависимости поверхностной энергии предлагается провести согласно формуле Гиббса - Толмена - Кенига - Баффа [2]:

$$\sigma(r) = \sigma_{\infty} \left( 1 - \frac{2\delta}{r} \right) \quad (1)$$

где  $\sigma_{\infty}$  соответствует плоской бесконечной поверхности;  $\delta = r_s - r$ ,  $r_s$  - радиус эквивалентной поверхности.

Необходимость учета описываемой размерной зависимости подтверждается тем фактом, что для нанокристаллитов удельный вклад поверхностной энергии составляет не менее 30 % полного термодинамического потенциала [3].

Роль поверхностной энергии для наноразмерных систем оказывается гораздо более существенной, чем для массивных объектов, свойства которых определяются в основном объемными вкладами в термодинамический потенциал. Для наночастиц величина поверхностного вклада сравнима по величине с объемным вкладом в энергию системы, что обуславливает уникальные свойства подобных объектов.

1. И.Д. Морохов, В.И. Петин, Л.И. Трусов, В.Ф. Петрунин // УФН. Т. 133. С. 653 - 692. 1981.
2. Оно С., Кондо С. Молекулярная теория поверхностного натяжения в жидкостях. М.: ИИЛ, 1963. 355 с.
3. С.В. Карпенко, А.П. Савинцев, А.И. Темроков // Физика металлов и металловедение. Т. 100. № 6. С. 1 - 4. 2005.

## О НЕКОТОРЫХ УПРУГИХ ПОСТОЯННЫХ НАНООБЪЕКТАХ

*Гавашели Д.Ш.*

*НИИ ПМА КБНЦ РАН, Нальчик*

*sv\_karpenko@mail.ru*

Интенсивное развитие нанотехнологий в последние годы привело к необходимости построения адекватных аналитических моделей, описывающих свойства наноразмерных объектов. В большинстве существующих моделей подобного рода принимается, что основные механические характеристики нанобъектов совпадают со своими значениями, полученными из макроскопических экспериментов. В качестве модели для исследования влияния масштабного фактора на механические характеристики материала рассматривается двумерная полоса из монокристаллического материала, обладающего гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой (треугольной решеткой). Взаимодействие между атомами считается парным. Основные результаты отвечают приближению, при котором в кристалле учитывается взаимодействие только ближайших соседей.

Прежде всего, было установлено, что в определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности многих макроскопических характеристик, таких как напряжение, модуль Юнга, удельная объемная энергия деформирования. Выбрать универсальное определение для размера нанобъекта не удастся: если добиваться того, чтобы модули упругости были максимально близки к своим макроскопическим значениям, видоизменяются соотношения Коши-Грина и нарушается симметрия тензора упругости кристалла. Если, напротив, выполнить соотношения Коши Грина, то значительно усиливается масштабный эффект. Согласно макроскопической теории упругости, напряжение  $\sigma_k$  и модуль упругости  $C_{kn}$  связаны с удельной энергией деформирования соотношениями Коши-Грина [1]

$$\sigma_k = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_k}, C_{kn} = \frac{\partial \sigma_k}{\partial \varepsilon_n} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_k \partial \varepsilon_n} \quad (1)$$

где  $U$  - энергия деформирования, отнесенная к единице объема.

Однако, макроскопические отношения Коши-Грина оказываются неверными для конечных  $N$ . В рассматриваемом случае соотношения Коши-Грина (1) должны быть модифицированы следующим образом

$$\sigma_1 = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_1}, \sigma_1 = \frac{N-1}{N_*} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_2}, C_{kn} = \frac{\partial \sigma_k}{\partial \varepsilon_n} \quad (2)$$

Для  $\sigma_1$  сохраняется макроскопическая формула, так как в направлении  $x$  кристалл бесконечен.

Механические свойства бесконечной кристаллической решетки, как правило, анизотропны, однако для нанокристалла на анизотропию, связанную с видом кристаллической решетки, накладывается еще одна анизотропия, вызванная его размерами и формой.

В рассмотренной задаче при уменьшении толщины нанокристалла коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает. Для особо тонких нанокристаллических пленок указанные модули могут в 2 раза отличаться от своих макроскопических значений. Данный вывод находится в хорошем соответствии с результатами, полученными при определении упругих модулей по экспериментальным данным [2], согласно которым значение модуля Юнга для тонкой пленки возрастает при уменьшении ее толщины. Однако для выяснения универсальности этого вывода необходима его дополнительная проверка для других типов кристаллических решеток, прежде всего трехмерных. Подводя итог всему вышеизложенному, можно сделать вывод, что понятия классической механики сплошной среды, и в том числе теории упругости, должны использоваться с большой осторожностью при их применении к нанобъектам. Обязательно следует учитывать изменение механических характеристик при приближении масштабов рассматриваемого объекта к нанометровым.

1. Ч.Китель Введение в физику твердого тела. 149 с.
2. Д.Л. Быков, Д.Н. Коновалов Тр. XXXVI Междунар. сем. "Актуальные проблемы прочности". Витебск (2000). 428 с.

## ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

*12 ЦНИИ МО РФ* — 12-ый Центральный научно-исследовательский институт Министерства обороны РФ  
*БАРНЦ* — Бейкер Атлас Российский научный центр  
*ИПМАШ РАН* — Институт проблем машиноведения РАН  
*ИПФ РАН* — Институт прикладной физики РАН  
*ИПХФ РАН* — Институт проблем химической физики РАН  
*ИСЭ СО РАН* — Институт сильноточной электроники Сибирского отделения РАН  
*ИТ СО РАН* — Институт теплофизики Сибирского отделения РАН  
*ИТФ РАН* — Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН  
*КБГУ* — Кабардино-Балкарский государственный университет  
*МФТИ* — Московский физико-технический институт (государственный университет)  
*НГУ* — Новосибирский государственный университет  
*НИИ ПМА КБНЦ РАН* — Научно-исследовательский институт прикладной математики и автоматизации Кабардино-Балкарского научного центра РАН  
*ОИВТ РАН* — Объединенный институт высоких температур РАН  
*РНЦ КИ* — Российский научный центр «Курчатовский институт»  
*РФЯЦ-ВНИИТФ* — Российский Федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. ак. Е.И. Забабахина  
*СПбГУ* — Санкт-Петербургский государственный университет  
*IIE* — Institute of Laser Engineering, Osaka University

## ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. *Ашитков Сергей Игоревич*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)3627788, факс: +7(495)3627788, ashitkov11@yandex.ru
2. *Башарин Андрей Юрьевич*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)362-56-03, факс: +7(495)362-56-03, ayb@iht.mpei.ac.ru
3. *Бочкарев Анатолий Александрович*, Организация не зарегистрирована, 630090, Новосибирск, Новосибирск, Проспект Лаврентьева, 1, тел.: +7(383)3321731, факс: +7(383)3308480, aboch@online.nsk.su
4. *Вайтанец Оксана Сафарбиевна*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Нальчик, ул. Шортанова, 89а, тел.: (8662)423971, факс: (8662)423876, sv\_karpenko@mail.ru
5. *Востриков Анатолий Алексеевич*, ИТ СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, д.1, тел.: +7(383)3308094, факс: +7(383)3308094, vostrikov@itp.nsc.ru
6. *Гавашели Давид Шотаевич*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Нальчик, ул. Шортанова, 89а, тел.: (8662)42-39-71, факс: (8662)42-38-76, sv\_karpenko@mail.ru
7. *Гасилов Сергей Владимирович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, sergei.gasilov@gmail.com
8. *Груздков Алексей Андреевич*, Организация не зарегистрирована, 191119, Санкт-Петербург, ул. Боровая, д. 24, кв. 9, тел.: +7(812)7122417, факс: +7(812)4286944, gruzdkov@mail.ru
9. *Ефремов Владимир Петрович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13/19, тел.: +7(495)4850963, факс: +7(495)4857990, efremov@ihed.ras.ru
10. *Захаренков Алексей Сергеевич*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, Пример: ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)-484-2456, факс: +7(495)4857990, strider@ihed.ras.ru
11. *Канель Геннадий Исаакович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4834374, факс: +7(495)4857990, kanel@fcr.ac.ru
12. *Карпенко Сергей Валентинович*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Нальчик, ул. Шортанова, 89а, тел.: (8662)423971, факс: (8662)423876, sv\_karpenko@mail.ru
13. *Копцева Анна Александровна*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Нальчик, ул. Шортанова, 89а, тел.: (8662)423971, факс: (8662)423876, sv\_karpenko@mail.ru
14. *Коровяков Дмитрий Александрович*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Нальчик, ул. Шортанова, 89а, тел.: (8662)423971, факс: (8662)423876, sv\_karpenko@mail.ru
15. *Кузнецов Владимир Васильевич*, ИТ СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д.1, тел.: +7(383)3307121, факс: +7(383)3308480, vladkuz@itp.nsc.ru
16. *Кузнецов Сергей Вячеславович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, Ижорская, д.13, стр.2., тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)485-7990, shenau@rambler.ru
17. *Куксин Алексей Юрьевич*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, kuksin@ihed.ras.ru
18. *Левашов Павел Ремирович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4842456, факс: +7(495)4857990, pasha@ihed.ras.ru
19. *Мамчугев Мухтар Османович*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Нальчик, ул. Шортанова, 89а, тел.: (8662)423971, факс: (8662)423876, sv\_karpenko@mail.ru
20. *Милявский Владимир Владимирович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4832295, факс: +7(495)4857990, vlvn@ihed.ras.ru
21. *Можарова Татьяна Сергеевна*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская д. 13, стр. 2, тел.: -, факс: -, tmozharova@gmail.com
22. *Норман Генри Эдгарович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, norman@ihed.ras.ru
23. *Орешкин Владимир Иванович*, Организация не зарегистрирована, 663405, Томск, пр.Академический д.2/3, тел.: (3822)492988, факс: (3822)491789, oreshkin@ovpe.hcei.tsc.ru
24. *Пахунова Юлия Олеговна*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Нальчик, ул. Шортанова, 89а, тел.: (8662)423971, факс: (8662)423876, sv\_karpenko@mail.ru
25. *Петровский Виктор Павлович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4859155, факс: +7(495)4857990, Petrovsky@ihed.ras.ru
26. *Петухов Вячеслав Александрович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская д. 13, стр. 2, тел.: +7(495)4858190, факс: +7 (495) 4857990, petukhov@ihed.ras.ru
27. *Писарев Василий Вячеславович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, pisarevvv@gmail.com
28. *Потапенко Андрей Иванович*, 12 ЦНИИ МО РФ, 141307, Московская обл., Сергиев Посад, -, тел.: +7(495)9930962, факс: -, a.potapenko@mail.ru
29. *Рудяк Валерий Яковлевич*, Организация не зарегистрирована, 630063, Новосибирск, 630063, а/я 258, тел.: +7 (383) 2668758, факс: +7 (383) 3321686, valery.rudyak@mail.ru
30. *Савинцев Алексей Петрович*, КБГУ, 360004, Нальчик, ул. Чернышевского, 173, тел.: +7(8662)423777, факс: =7(8662)422560, png@kbsu.ru
31. *Сасиновский Юрий Константинович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул.Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4859155, факс: +7(495)4857990, Petrovsky@ihed.ras.ru
32. *Сергеев Олег Вячеславович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, seoman@yandex.ru
33. *Скобелев Игорь Юрьевич*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, skobelev@ihed.ras.ru
34. *Смирнов Александр Ильич*, ИПФ РАН, 603950, Нижний Новгород, ул. Ульянова, д. 46, тел.: +7(831)4160656, факс: 7(831)4160616, smirnov@appl.sci-nnov.ru
35. *Стариков Сергей Валерьевич*, ОИВТ РАН, 125412, Московская обл., Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, starikov@ihed.ras.ru
36. *Стегайлов Владимир Владимирович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, строение 2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, stegailov@ihed.ras.ru

37. *Федяева Оксана Николаевна*, ИТ СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, д.1, тел.: +7(383)3308094, факс: +7(383)3308094, fedyaeva@itp.nsc.ru
38. *Хищенко Константин Владимирович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4842456, факс: +7(495)4857990, konst@ihed.ras.ru
39. *Храпач Иван Николаевич*, Организация не зарегистрирована, 141707, Московская обл., Долгопрудный, ул. Первомайская, д.30, стр. 3, тел.: +79057461871, hrapach\_ivan@mail.ru
40. *Ченцов Алексей Викторович*, ОИВТ РАН, 125412, Московская обл., Москва, ул. Артамонова, д. 4, к. 1, кв. 50, тел.: 8-916-3873270, факс: 8-916-3873270, alche8411@mail.ru
41. *Чефонов Олег Владимирович*, Организация не зарегистрирована, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)3627788, факс: +7(495)4857990, oleg.chefonov@gmail.com
42. *Янилкин Алексей Витальевич*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, yanilkin@ihed.ras.ru