

Новый Фон 2010

23 июля – 1 августа



8-й Российский симпозиум

Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах

Тезисы докладов

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

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
8-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

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

В сборнике представлены тезисы докладов 8-го Российского симпозиума «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Новый Афон, 23 июля - 1 августа 2010 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, пылевая плазма, взаимодействие мощных ионных, электронных и лазерных пучков с веществом, биофизика и биохимия ультракоротких процессов, ультракороткие процессы на поверхности, научные основы нанотехнологий. Рассмотрены экспериментальные исследования, теория и атомистическое моделирование релаксации и динамических процессов. Специфика Симпозиума предполагает рассмотрение, в первую очередь, экспериментальных и теоретических работ, которые анализируют динамику процессов в конденсированном веществе на молекулярном уровне и/или связывают мезо- и макроскопические подходы с молекулярными процессами.

Под редакцией
Нормана Г. Э., Савинцева А. П., Стегайлова 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
Янилкин А.В., учёный секретарь, ОИВТ РАН, Москва

Симпозиум проведен при поддержке РФФИ (грант №10-02-06143).

Веб-сайт Симпозиума
<http://www.ihed.ras.ru/afon10>

Фото-панорама Нового Афона с Иверской горы: Сергеев О. В., ОИВТ РАН

Отпечатано в ОИВТ РАН, г. Москва

ОГЛАВЛЕНИЕ

СЕКЦИЯ 1. ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ ТВЁРДЫХ ТЕЛ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

<i>Груздков А.А., Петров Ю.В., Уткин А.А.</i> Моделирование откола: некоторые проблемы интерпретации экспериментальных данных	5
<i>Красюк И.К., Пашинин П.П., Семенов А.Ю., Хищенко К.В.</i> Изучение механической прочности полиметилметакрилата при лазерном инициировании больших скоростей деформирования	5
<i>Норман Г.Э., Янилкин А.В.</i> Гомогенное зарождение дислокаций	5
<i>Гаркушин Г.В., Разоренов С.В., Канель Г.И.</i> Сопротивление деформированию и разрушению алюминия АЦ1 в условиях ударно-волнового нагружения при нормальных и повышенных температурах	5
<i>Краснова П.А.</i> Аналитическая модель разрушения хрупких материалов при интенсивном температурном воздействии	6
<i>Горохова И.В.</i> Асимптотика спектра малых поперечных колебаний вязкоупругого стержня под действием распределенной силы	6

СЕКЦИЯ 2. МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ИХ РАСПАД

<i>Коробенко В.Н., Савватимский А.И., Фортвов В.Е.</i> Свойства жидкого углерода при введенных энергиях, сравнимых с энергией сублимации	8
<i>Норман Г.Э., Писарев В.В.</i> Кристаллизация переохлажденного расплава алюминия. молекулярно-динамическое исследование	8
<i>Мионов В.А., Смирнов А.И., Смирнов Л.А.</i> Асимптотическое описание динамики изогнутых темных солитонов в бозе-эйнштейновском конденсате	9
<i>Мальцев И.В., Мирзоев А.А.</i> Молекулярно-динамическое моделирование вязкости жидкого железа: параметры моделирования и результаты	9
<i>Смирнов Г.С., Стегайлов В.В.</i> Молекулярно-динамическое моделирование гидрата метана	10

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

<i>Брякина У.Ф., Тереза А.М., Шаргатов В.А., Губина Т.В., Губин С.А.</i> Определение границы применимости модели химической равновесной смеси к продуктам детонации газовых смесей	11
<i>Павлович А.Л., Митрофанова О.В., Губин С.А.</i> Производство энтропии в ламинарных и вихревых течениях <i>Колесников С.А., Голубев А.А., Демидов В.С., Дудин С.В., Канцырцев А.В., Лавров В.В., Минцев В.Б., Савченко А.В., Смирнов Г.Н., Туртиков В.И., Уткин А.В., Шестов Л.М., Фортвов В.Е., Шарков Б.Ю.</i> Экспериментальное определение характеристик детонационных волн в конденсированных ВВ при помощи метода протонной радиографии	11
<i>Федоров А.В., Фомин В.М.</i> Физико-математическое моделирование волновых процессов гетерогенных смесей <i>Тен К.А., Титов В.М., Прууэл Э.Р., Толочко Б.П., Жогин И.Л., Лукьянчиков Л.А.</i> Измерение размеров наночастиц путем регистрации рассеяния синхротронного излучения	12
<i>Тен К.А., Ефремов В.П., Беспалов Е.В., Прууэл Э.Р., Лукьянчиков Л.А., Толочко Б.П., Жогин И.Л.</i> Ударное сжатие наноструктурного SiO ₂ аэрогеля	13
<i>Хищенко К.В.</i> Уравнение состояния и фазовые превращения углерода в волнах ударного сжатия и адиабатического расширения	13
<i>Шумова В.В., Зиборов В.С., Ефремов В.П.</i> Неравновесные процессы в релаксационной зоне ударной волны в аргоне с малой примесью гексакарбонила молибдена	14

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

<i>Поляков Д.Н., Василяк Л.М., Шумова В.В., Петров О.Ф.</i> Пылевые образования в криогенной плазме тлеющего разряда с продольным градиентом температуры	15
<i>Орешкин В.И., Русских А.Г., Чайковский С.А.</i> Исследование транспортных свойств металлов в двухфазной области	15
<i>Орешкин Е.В., Огинов А.В., Чайковский С.А., Шпаков К.В.</i> Тормозное излучение быстрых электронов в длинных газовых промежутках	15
<i>Савватимский А.И.</i> Аномальная электронная эмиссия конденсированного металла и «взрывная» эмиссия электронов	16
<i>Саитов И.М., Норман Г.Э., Ланкин А.В.</i> Флуктуации давления в неидеальной невырожденной плазме <i>Тимофеев А.В.</i> Разогрев вертикального и горизонтального движения системы пылевых частиц в плазме газового разряда	16
<i>Шумова В.В., Василяк Л.М., Поляков Д.Н.</i> Гидродинамическая модель положительного столба тлеющего разряда с пылевыми частицами	17

СЕКЦИЯ 5. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЩНЫХ ИОННЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ С ВЕЩЕСТВОМ

<i>Савинцев А.П., Гавашели Д.Ш., Гавашели Ю.О.</i> Изучение механизмов пробоя прозрачных твердых тел наносекундными лазерными импульсами	19
<i>Иванов К.А., Урюпина Д.С., Волков Р.В., Савельев А.Б., Брантов А.В., Быченков В.Ю., Ерёмин Н.В., Пасхалов А.А.</i> Взаимодействие лазерного импульса суб-релятивистской интенсивности с микроструктурированной поверхностью жидкого металла	19

<i>Князев Н.С., Хищенко К.В.</i> Уравнение состояния многокомпонентного газа адронов с поправкой вандерваальсова типа и фазовый переход к кварк-глюонной плазме	20
<i>Петровский В.П., Верекишко П.С., Сенченко В.Н., Семенов В.Н., Шейндлин М.А.</i> Электрофизические характеристики теплозащитного материала РТП-200 при экстремальных тепловых нагрузках	20
<i>Пугачёв Л.П., Левашов П.Р.</i> Расчёт кильватерного поля при воздействии лазерного импульса на плазму методом PIC	21
<i>Скобелев И.Ю., Фаенов А.Я., Пикуз Т.А., Лобода П.А., Магунов А.И.</i> База данных $spectr-w^3$ для спектроскопии плазмы и других приложений	21
<i>Сергеев О.В., Стегайлов В.В.</i> Электрон-фононная релаксация в металлах при неравновесном возбуждении электронной подсистемы	21
<i>Левашов П.Р., Синько Г.В., Смирнов Н.А., Хищенко К.В.</i> Количественное сравнение результатов полно-электронных и псевдопотенциальных расчетов теплоемкости и давления электронов в кристаллах с покоящимися ядрами	22
<i>Стариков С.В., Стегайлов В.В.</i> Влияние эффектов электронной температуры на фемтосекундную абляцию золота: от квантовых расчетов к атомистическому моделированию	22
<i>Фокин В.Б., Левашов П.Р., Поварницын М.Е., Хищенко К.В.</i> Численное моделирование воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на металлическую фольгу: гидродинамический и комбинированный подходы	22
СЕКЦИЯ 6. БИОФИЗИКА И БИОХИМИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ПРОЦЕССОВ	
<i>Воробьев Ю.Н.</i> Метод молекулярной динамики белков с учетом ионизационно-конформационной связи и равновесного титрования	24
<i>Петровский В.П., Петровская Е.В.</i> Фемтосекундная лазерная нанобиотехнология объект оценки в виде «единой технологии»	24
СЕКЦИЯ 7. УЛЬТРАКОРОТКИЕ ПРОЦЕССЫ НА ПОВЕРХНОСТИ	
<i>Жукова И.Н., Игуменов И.К., Головнев И.Ф.</i> Молекулярно-динамическое исследование процессов адсорбции прекурсоров на поверхности кремния и меди	25
СЕКЦИЯ 8. НАУЧНЫЕ ОСНОВЫ НАНОТЕХНОЛОГИЙ	
<i>Фомин В.М., Борисова Т.А., Филиппов А.А., Брусенцев А.Г.</i> Влияние нанодисперсных частиц на механические свойства гетерогенного материала	26
<i>Верещагин А.С., Зиновьев В.Н., Пак А.Ю., Фомина А.Ф., Казанин И.В., Лебига В.А., Фомин В.М.</i> Исследование избирательно проницаемых микрообъектов по отношению к гелию	26
<i>Головнев И.Ф., Александрова Н.К., Игуменов И.К., Кучумов Б.М., Фомин В.М.</i> Исследование влияния газодинамических процессов на осаждение веществ в нанопорах	27
<i>Головнева Е.И., Головнев И.Ф., Фомин В.М.</i> Молекулярно-динамическое исследование влияния границы раздела гетероструктуры на механические свойства	27
<i>Жилин А.А., Федоров А.В.</i> Влияние акустических явлений на процессы переноса в материалах с микрокапиллярной пористой структурой	28
<i>Игошкин А.М., Головнев И.Ф., Фомин В.М.</i> Молекулярно динамическое исследование формирования нано-структур при осаждении паров металла из газовой фазы	28
<i>Ожгибесов Д.С., Головнев И.Ф., Фомин В.М.</i> Молекулярно-динамический расчет газодинамического потока гелия в наноканалах	29
<i>Фомин В.М., Головнев И.Ф.</i> Молекулярно-динамическое исследование термодинамических свойств наноструктур	29
<i>Харламов Г.В.</i> Моделирование термодинамических параметров нанокпель методом молекулярной динамики	30
ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ	31
ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ	32

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКОЛА: НЕКОТОРЫЕ ПРОБЛЕМЫ ИНТЕРПРЕТАЦИИ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ**

*Груздков А.А.^{*1}, Петров Ю.В.², Уткин А.А.²*

¹СПбГУ, ²ИПМАШ РАН, Санкт-Петербург

**gruzdkov@mail.ru*

Испытания на откол являются одним из наиболее распространенных методов изучения прочностных свойств материалов в условиях динамического нагружения. Многочисленные экспериментальные показывают, что на кривой «долговечности» (т.е. зависимости времени до разрушения от напряжения) можно выделить две ветви — статическую, когда критическое напряжение почти не зависит от длительности процесса, и динамическую, когда время до разрушения практически не зависит от напряжения. Применение при моделировании разрушения критерия инкубационного времени позволяет получить обе ветви в рамках одной модели при фиксированных параметрах.

Испытания на откол могут служить удобным инструментом определения параметров материала, характеризующих его динамическую прочность. Однако более внимательное рассмотрение вскрывает ряд проблем, связанных с корректной интерпретацией эксперимента, которым, на наш взгляд, часто не уделяется должного внимания. Корректный анализ требует независимого определения места и времени разрушения, напряжения в момент разрушения, учета возможного запаздывания разрушения, а так же ясного понимания, какой масштабный уровень представляет интерес в данном исследовании.

**ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА ПРИ
ЛАЗЕРНОМ ИНИЦИИРОВАНИИ БОЛЬШИХ СКОРОСТЕЙ ДЕФОРМИРОВАНИЯ**

*Красюк И.К.^{*1}, Пашинин П.П.¹, Семенов А.Ю.¹, Хищенко К.В.²*

¹ИОФ РАН, ²ОИВТ РАН, Москва

**krasyuk99@rambler.ru*

Использование лазеров с короткой длительностью излучения даёт уникальную возможность изучения прочностных свойств твердого тела при больших скоростях деформирования, недостижимых при других способах воздействия на исследуемые материалы. Динамическая прочность вещества в области предельно малых длительностей нагрузки исследуется путём анализа откольных явлений при отражении импульсов сжатия от свободной поверхности мишени. После отражения импульса сжатия от тыльной поверхности внутри мишени генерируются растягивающие напряжения, которые могут привести к его внутреннему разрыву – отколу. Для исследования откольного явления в полиметилметакрилате (ПММА) было использовано два метода воздействия на мишень: (а) непосредственное облучение лазерным импульсом (длительность 2.5 и 37 нс) и (б) ударное воздействие длительностью 1.5 и 2.7 нс помощью лазерно-ускоренных тонких фольг. В качестве ударников использованы алюминиевые фольги толщиной 8 и 15 мкм. Масса и скорость фольг после лазерного абляционного ускорения определялись методом их торможения в газовой атмосфере. В работе экспериментально определялось положение плоскости откола. Затем в этой плоскости с помощью численного гидродинамического кода с учетом реального широкодиапазонного полумэмпирического уравнения состояния ПММА вычислялись графики изменения во времени давления и удельного объема. Момент времени откола фиксировался пленочным датчиком давления в сочетании с цифровым осциллографом LeCroy WR 44Xi, что позволяло определять в каждом опыте величины откольной прочности и скорости деформирования. В результате проведенных экспериментов получена зависимость откольной прочности ПММА от скорости деформирования в диапазоне $2 \cdot 10^5$ - $1 \cdot 10^7$ 1/с. При этом достигнута теоретическая величина предельной откольной прочности ПММА, равная 9.8 кбар.

ГОМОГЕННОЕ ЗАРОЖДЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ

*Норман Г.Э., Янилкин А.В.**

ОИВТ РАН, Москва

**aleyanilkin@gmail.com*

Исследованы механизм и стохастические свойства процесса гомогенного зарождения дислокаций. Предложен подход для определения скорости зарождения на основе рассмотрения времён жизни метастабильного состояния. Для получения первичных данных использован метод молекулярной динамики. Определены зависимости скорости нуклеации от значений сдвиговых напряжений для нескольких температур. На основе полученных данных проведён сравнительный анализ с теоретическими подходами, сделаны выводы об ограниченности предсказательной силы таких подходов. Проведена оценка области сдвиговых напряжений и температур, в которой может реализоваться механизм гомогенного зарождения дислокаций.

**СОПРОТИВЛЕНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЮ И РАЗРУШЕНИЮ АЛЮМИНИЯ АД1 В
УСЛОВИЯХ УДАРНО-ВОЛНОВОГО НАГРУЖЕНИЯ ПРИ НОРМАЛЬНЫХ И
ПОВЫШЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ**

*Гаркушин Г.В.^{*1}, Разоренов С.В.¹, Канель Г.И.²*

¹ИПХФ РАН, Черноголовка, ²ОИВТ РАН, Москва

**garkushin@ficp.ac.ru*

Исследования температурных зависимостей сопротивления деформированию и разрушению металлов и сплавов при высоких скоростях деформирования позволяют изучить основные закономерности движения носителей

пластической деформации дислокаций, выявить определяющие факторы и закономерности формирования и развития поврежденностей в материале. Эти сведения нужны для понимания механизмов локализации деформации в полосах адиабатического сдвига, оптимизации режимов механической обработки материалов, а также для решения задач высокоскоростного удара и пробивания.

Известно, что напряжение течения кристаллических твердых тел возрастает с увеличением скорости нагружения. Для многих металлов эта зависимость резко усиливается с превышением скорости деформирования 10^3 - 10^4 с⁻¹, что интерпретируется как следствие изменения механизма движения дислокаций. При малых скоростях деформирования дислокации преодолевают препятствия в результате совместного действия приложенного напряжения и тепловых флуктуаций. Вследствие этого увеличение температуры сопровождается понижением предела текучести материалов. Для деформирования с высокой скоростью необходимо приложить более высокие напряжения. При достаточно большой скорости деформирования действующие напряжения оказываются настолько высокими, что дислокации оказываются способными преодолевать препятствия без дополнительного вклада тепловых флуктуаций. При этом доминирующим механизмом торможения становится фонная вязкость. Поскольку фонная вязкость пропорциональна температуре, при очень высоких скоростях деформирования можно ожидать возрастания напряжения течения с увеличением температуры.

В работе представлены результаты измерений динамического предела упругости и откольной прочности при ударно-волновом нагружении образцов алюминия АД1 толщиной от 0.5 мм до 10 мм при нормальной 20° С и повышенной до 600° С температурах. Импульсы ударной нагрузки амплитудой 9 ГПа создавались в образцах при соударении с плоскими алюминиевыми ударниками, разогнанными с помощью специальных взрывных устройств. Толщина образцов в 3-5 раз превышала толщину ударников, скорость соударения составляла 600-660 м/с. Характер деформирования и разрушения, а также количественные характеристики процесса - давление ударного сжатия, динамический предел упругости, откольную прочность, толщину откольной пластины, скорость деформирования перед разрушением определяли из анализа профилей скорости свободной поверхности образцов, непрерывная регистрация которых проводилась с помощью лазерного Доплеровского измерителя скорости "VISAR".

В результате проведенной работы было подтверждено аномальное термическое упрочнение алюминия в условиях высокоскоростного деформирования. Анализ затухания предвестников при температурах 20° С и 600° С показывает, что смена основного механизма торможения дислокаций происходит при скорости деформирования примерно 5×10^3 с⁻¹, что согласуется с результатами измерений методом стержней Гопкинсона. Динамический предел упругости монокристаллов при 600° С выше, а его падение со временем происходит быстрее, чем в алюминии АД1. Результаты измерений откольной прочности в широком диапазоне скоростей деформирования дополняют полученные ранее данные и согласуются с ними.

Работа выполнена при поддержке Госкорпорации "Росатом" в рамках государственного контракта № Н.4е.45.03.09.1073 и комплексной программы ОЭММПУ РАН "Трибологические и прочностные свойства структурированных материалов и поверхностных слоев".

АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАЗРУШЕНИЯ ХРУПКИХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИНТЕНСИВНОМ ТЕМПЕРАТУРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Краснова П.А.

ОИВТ РАН, Москва

polikarp@ihed.ras.ru

Во многих механических устройствах используются изделия, поверхность которых термически обработана лазерным излучением с целью улучшения эксплуатационных свойств. Например, автомобильные тормозные диски подвергаются лазерной обработке для создания поверхностного слоя, способного противостоять износу. Температурные напряжения при быстром нагреве могут вызывать внутреннее растрескивание, которое приводит к существенной деградации механических свойств элемента конструкции. В случае возникновения упруго-пластического течения в области сжатия после остывания на поверхности возникают растягивающие остаточные напряжения, которые способны спровоцировать повышенный износ материала.

Для моделирования данного процесса рассматриваются упруго-хрупкая полуплоскость и упруго-хрупкий бесконечный диск. Предполагается, что на границе может быть задан либо постоянный тепловой поток, либо переменная во времени температура. Сравниваются различные методики. Для нахождения распределения температуры в образце был использован приближенный метод. При этом был учтен тот факт, что коэффициент теплопроводности зависит от температуры. Был предложен метод решения нелинейного уравнения теплопроводности. Также проведен анализ нелинейных эффектов в напряженном состоянии образца. Построена упруго-пластическая модель как для одномерной задачи для полуплоскости, так и для осесимметричного напряженного состояния в диске. Были найдены остаточные напряжения. В целом был проведен анализ критических напряжений, которые могут возникать как на границе, так и внутри тела. Предложены некоторые методы предупреждения разрушений, возникающих за счет такого рода напряжений.

АСИМПТОТИКА СПЕКТРА МАЛЫХ ПОПЕРЕЧНЫХ КОЛЕБАНИЙ ВЯЗКОУПРУГОГО СТЕРЖНЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ РАСПРЕДЕЛЕННОЙ СИЛЫ

Горохова И.В.

ЮНПУ, Одесса, Украина

i.gorochova@rambler.ru

Существует большое количество работ, в которых изучаются поперечные колебания упругих стержней с разными условиями закрепления концов [1], [2]. Класс задач о колебаниях демпфированных упругих стержней, т.е. стержни находятся под действием внешнего трения, рассматривались в работах [3], [4]. Колебания вязкоупругого стержня, т.е. колебания с внутренним трением рассматривали [5], [6].

Рассмотрена спектральная задача, связанная с описанием малых поперечных колебаний однородного вязкоупругого стержня с сосредоточенными массами на концах. Левый и правый конец стержня закреплены шарнирно

и несут различные сосредоточенные массы. Описано расположение спектра такой задачи и получена асимптотическая формула для собственных значений. По спектру задачи последовательно можно найти параметры задачи, т.е. решить обратную задачу.

1. В.В. Болотин Неконсервативные задачи теории упругой устойчивости. М.:Гос.изд. физ.матем. лит., 1961.
2. I.S. Rao Dynamics of Plates Narosa Publising House, New Deli, 1998. P.560.
3. M. Moller, V. Pivovarchik Spectral Properties of a Fourth Order Differential Equation // Zeitschrift fur Analysis und ihre Anwendungen Journal for Analysis and its Applications. European Mathematical Society. V.25 2006.P.341.
4. V.N. Pivovarchik On spectra of a certain class of quadratic operator pencils wiht onedimensional linear part // Укр. матем. ж., Т.59, 2007. P.702.
5. И.П. Андрейчиков, В.И. Юдович Известия АН СССР//МТТ, 1974. №2. с.74.
6. M.P. Paudoussis, N.T. Issid //J.Sound and Vibration, V.33. №3, P.267.

СВОЙСТВА ЖИДКОГО УГЛЕРОДА ПРИ ВВЕДЕННЫХ ЭНЕРГИЯХ, СРАВНИМЫХ С ЭНЕРГИЕЙ СУБЛИМАЦИИ

Коробенко В.Н.* , Савватимский А.И., Фортвов В.Е.

ОИВТ РАН, Москва

*komitet@iht.mpei.ac.ru

В [1] представлен изохорный нагрев при постоянной плотности жидкого углерода. Изохорическим условиям нагрева соответствовала постоянная плотность углерода для трех экспериментов: 1.1 г/см.куб.; 1.76 г/см.куб; 1.88 г/см.куб. Температура выше точки плавления оценена по формуле $\Delta E = C_V(T - T_M)$, где ΔE – введенная удельная энергия; $C_V = 3$ Дж/г К – теплоемкость при постоянном объеме для жидкого углерода (рассчитана авторами ранее из эксперимента); $T_M = 4800$ К (измерена авторами ранее). В случае анизотропного графита (начальная плотность 2.2 г/см.куб) максимальная достигнутая температура T составила 23 000 К для максимальной введенной энергии $E = 75$ кДж/г. Проведено сравнение с экспериментом [2], в котором использовалось постоянное давление (от 14 до 94 кбар) и импульсный электрический (миллисекундный) нагрев. Как оказалось, поведение жидкого углерода при высоком давлении напоминает поведение жидкого лития. Нитон и Ашкрофт [3] предсказали рост электросопротивления лития при повышенном давлении. Это предсказание было подтверждено в эксперименте, который обсуждается в [4]. Укажем еще на один металл, который ведет себя подобно жидкому углероду и литию, это жидкий вольфрам.

Быстрый нагрев плотного (2 г/см.куб) изотропного графита MF-307 (японского производства) с целью введения больших удельных энергий (при больших импульсных давлениях) фактически повторил результат. Качественно получена та же картина, что и при нагреве анизотропного графита: снижение сопротивления после плавления и затем, при давлениях, предположительно более 50 кбар, – рост электросопротивления. Расчет максимальной температуры по прежней формуле $\Delta E = C_V(T - T_M)$, дает ~ 35000 К для $E = 110$ кДж/г. Таким образом, предварительные опыты с углеродом подтвердили возможность получения высокой плотности энергии при импульсном нагреве (без применения взрывчатых веществ).

Преимущество нагрева импульсом тока состоит в возможности применения более высокой скорости нагрева (не требуется времени для прогрева всего образца как в случае поверхностного лазерного нагрева). Это позволило достичь более высоких удельных энергий вложенных в проводник, т.е. более высоких температур (вплоть до десятков кК для металлов и 35 кК для углерода). При этом за счет применения образцов в виде тонких фольг за время около 1 микросекунды нормальное тепловое расширение (со скоростью звука) реализуется по малому размеру образца. Все это позволяет определять равновесные теплофизические свойства вещества, несмотря на очень высокую скорость нагревания. Особым обстоятельством является реализованные в лаб.35 ОИВТ РАН исследования сверхкритических состояний тугоплавких веществ. Это стало возможным при создании высокого давления (нагрев в ограниченном объеме) и измерении импульсного давления (10-100 кбар) по смещению линии люминесценции рубина. В обзоре 2009 года [5] показан спектр экспериментальных исследований по изучению экстремальных состояний вещества на Земле и в космосе.

Работа выполнена при поддержке гранта Президиума РАН (П-12) и гранта РФФИ № 8-10-00114а.

[1] Savvatimskiy A.I. CARBON, Experimental electrical resistivity of liquid carbon in the temperature range from 4800 to $\sim 20,000$ K, 2009, V.47, P. 2322-2328.

[2] Togaya M Physical Review Letters 79 (13) 2474 (1997)

[3] J. V. Neaton, N. W. Ashcroft Pairing in Dense Lithium, Nature 400, 141 - 144 (08 Jul 1999).

[4] Максимов Е.Г., Магницкая М.В., Фортвов В.Е. «Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях». УФН. 2005. Т.175. №8. С.793-813.

[5] В.Е.Фортвов, Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе, УФН, 2009, Т.179, №6, С. 653-687.

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА АЛЮМИНИЯ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Норман Г.Э., Писарев В.В.*

ОИВТ РАН, Москва

*pisarevvv@gmail.com

В работе рассмотрено молекулярно-динамическое (МД) исследование спонтанной кристаллизации переохлажденного расплава алюминия. Расплав описывался системой с потенциалом внедренного атома (ЕАМ) в параметризации, предложенной в [1]. Моделирование проводилось для систем при постоянном объеме.

Найдены распределения времен жизни расплава при температурах 670 К и 750 К в диапазоне давлений от 20 кбар до 70 кбар. Показано, что процесс зарождения кристалла носит пуассоновский характер. Это означает, что в переохлажденном расплаве со временем не накапливаются структуры, облегчающие возникновение кристаллического зародыша. Появление кристаллита в системе определяется тепловыми флуктуациями, а не по механизму накопления 12-координированных атомов, предложенного в [2].

Были определены средние времена жизни переохлажденного расплава в зависимости от давления. По этим результатам вычислена частота гомогенной нуклеации. Результаты аппроксимированы в виде $J = J_0(T) \exp(-\Delta G^*/kT)$, характерном для классической теории нуклеации (КТН). В этом выражении свободная энергия образования критического зародыша ΔG^* зависит от степени переохлаждения и поверхностного натяжения жидкость-кристалл. Множитель J_0 и поверхностное натяжение γ_{sl} найдены как параметры аппроксимации. Величина множителя J_0 сопоставлена с величиной кинетического множителя в форме Келтона [3]:

$$J_0^K = Z \rho_{liq} \frac{D n^{*2/3}}{\lambda^2},$$

где Z – множитель Зельдовича, ρ_{liq} – плотность жидкости, D – коэффициент самодиффузии, n^* – число атомов в критическом зародыше, λ – длина перескока атома.

В независимых МД расчетах была определена зависимость коэффициента самодиффузии в расплаве от температуры, длина перескока оценена как $\rho_{liq}^{-1/3}$. Найденные значения кинетического множителя J_0^K согласуются со значениями J_0 , полученными из зависимости $J(P)$.

1. M. I. Mendeleev et al. Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu. // Philosophical Magazine. 2008. V. 88, № 12. PP. 1723-1750.
2. Д.К. Белашенко, О.И. Островский. Кристаллизация никеля при больших переохлаждениях по данным молекулярной динамики. // Журнал физической химии. 2008. Т. 82, № 3 С. 443-455.
3. K. F. Kelton, in Crystal Nucleation in Liquids and Glasses, edited by H. Ehrenreich and D. Turnbull. Academic, Boston, 1991, V. 45, PP. 75-177.

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДИНАМИКИ ИЗОГНУТЫХ ТЕМНЫХ СОЛИТОНОВ В БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНОВСКОМ КОНДЕНСАТЕ

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

ИПФ РАН, Нижний Новгород

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

В работе предложен новый асимптотический подход, позволяющий детально описать динамику изогнутого тёмного солитона в бозе-эйнштейновском конденсате (БЭК) в терминах локальной скорости его движения и кривизны линии, около которой он сосредоточен. Этот подход справедлив до тех пор, пока ширина провала концентрации БЭК мала по сравнению с радиусом кривизны опорной кривой. В местах, где нарушаются условия его применимости, возникают вихри или двухмерные образования, похожие на солитоны Кадамцева-Петвиашвили. Полученная самосогласованная система уравнений для скорости и кривизны позволяет изучить поведение изогнутых тёмных солитонов на нелинейной стадии поперечной неустойчивости и наглядно проанализировать, как рождаются вихревые структуры. Нами были, в частности, найдены автомодельные решения, соответствующие процессу вихреобразования.

Нелинейная стадия модуляционной неустойчивости развивается по-разному для изначально покоящихся («чёрных») и движущихся («серых») солитонов. В первом случае модуляционная неустойчивость приводит к формированию цепочки из эквидистантно расположенных покоящихся вихрей с чередующимися по знаку топологическими зарядами. Причём существуют режимы, в которых цепочка вихрей окончательно образуется лишь после многократного восстановления квазисолитонной структуры. В «серых» же солитонах топологические дефекты зарождаются из точек опорной линии, где концентрация БЭК впервые проваливается до нуля. В конечном итоге возникает семейство движущихся пар «вихрь-антивихрь». Если начальная скорость «серого» солитона стремится к скорости звука в конденсате, нелинейная стадия неустойчивости заканчивается возникновением локализованных безвихревых структур, похожих на двухмерные солитоны уравнения Кадамцева-Петвиашвили.

Справедливость развитых теоретических представлений подтверждена и проиллюстрирована непосредственным численным моделированием эволюции изогнутых тёмных солитонов, выполненным в рамках уравнения Гросса-Питаевского для волновой функции конденсата.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №09-02-97059) и Федерального агентства по образованию (государственный контракт №П189).

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЯЗКОСТИ ЖИДКОГО ЖЕЛЕЗА: ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Мальцев И.В. , Мирзоев А.А.*

ЮУрГУ, Челябинск

**maltsev.ilya@gmail.com*

Целью работы является расчет вязкости жидкого железа в широком интервале температур методом Грина-Кубо, с использованием потенциалов погруженного атома, разработанных Белашенко [1] и Менделевым и др. [2], а также определение погрешности моделирования. Особое внимание уделяется выявлению влияния параметров модели.

Получена температурная зависимость вязкости железа выше температуры плавления. Сравняются зависимости, полученные для использованных потенциалов.

Расчет сдвиговой вязкости методом Грина-Кубо сопряжен с вычислением автокорреляционной функции тензора давления, получение которой требует усреднения по большому количеству конфигураций. Для каждого значения температуры выполнен блок расчетов, по которым построена автокорреляционная функция, получено значение вязкости и вычислена погрешность.

В работе рассмотрено влияние различных параметров модели: размер молекулярно-динамической ячейки, величина шага интегрирования, параметр термостата, предельное значение интеграла в методе Грина-Кубо. Обнаружено, что варьирование каждого из параметров по отдельности приводит к изменению вязкости на величину порядка 1 процента.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России"

1. Белашенко Д.К. Применение модели погруженного атома к жидким металлам. Жидкое железо. // Журнал Физической Химии. 2006. V.80. P.1.
2. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J. et al. Development of New Interatomic Potentials Appropriate for Crystalline and Liquid Iron. // Phil.Mag.A. 2003. V.83. P.3977.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТА МЕТАНА

Смирнов Г.С. , Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва

**grs90@mail.ru*

Газовые гидраты - твердые соединения включения, в которых молекулы газа заключены в полостях, образованных водородными связями молекул воды. В зависимости от молекул газа и внешних условий могут формироваться 3 различные структуры: sI, sII и sH, отличающиеся размерами полостей и типом кристаллической решетки[1].

В данной работе исследовалась sI структура гидрата метана, так как она является наиболее распространенной в природе. sI структура имеет кубическую решетку; молекулы воды в ней образуют два додекаэдра и шесть тетракайдекаэдров на одну элементарную ячейку. Кратко формула элементарной ячейки записывается в виде $(5^{12})_2 \cdot (5^{12}6^2)_6 \cdot 46\text{H}_2\text{O}$. Для задания начальной структуры атомов водорода использовалась минимизация суммарного дипольного момента с учётом правил Бернала-Фаулера. В качестве потенциалов взаимодействия использовались потенциалы Леннарда-Джонса и Кулона:

$$U_{ij} = 4\epsilon_{ij}[(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}})^{12} - (\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}})^6] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

где U_{ij} потенциальная энергия, r_{ij} расстояние между атомами, q_{ij} парциальный заряд, ϵ_{ij} и σ_{ij} параметры Леннарда-Джонса между атомами i и j . Для взаимодействия вода-вода использовались две модели: SPC/E и TIP4P/2005. Для взаимодействия метан-метан был выбран потенциал объединённого атома OPLS-UA. Параметры взаимодействия вода-метан задавались по правилу Лоренца-Бетгло с учётом оптимизационной поправки[2]. Использовались трёхмерные периодические граничные условия, шаг интегрирования уравнений Ньютона был равен 1 фемтосекунде. Потенциалы Леннарда-Джонса и Кулона обрезались на расстоянии 13 Å. Для учёта дальнего действия использовался алгоритм PPPM (particle-particle-particle mesh).

Для двух моделей воды была определена кинетическая граница устойчивости. Затем была вычислена точка фазового равновесия для системы гидрат-(вода и метан). Сравнение с экспериментальной кривой фазового равновесия позволило отмасштабировать границу устойчивости гидрата для сравнения с экспериментальными данными. Расчёты проведены на вычислительном кластере МФТИ-60.

1. Sloan E.D., Koh C.A. Clathrate hydrates of natural gases. — Boca Raton: CRC Press, 2008
2. Docherty H., Galindo A., Vega C. [et al.]. A potential model for methane in water describing correctly the solubility of the gas and the properties of the methane hydrate // J.Phys.Chem.-2006.—V.125, N.7.—P.074510–074519.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКИ РАВНОВЕСНОЙ СМЕСИ К ПРОДУКТАМ ДЕТОНАЦИИ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

*Брякина У.Ф., Тереза А.М., Шаргатов В.А., Губина Т.В., Губин С.А.**

МИФИ, Москва

**gubin_sa@mail.ru*

Целью данной работы является определение границ применимости модели химически равновесной смеси продуктов взрыва для типичных задач о детонации топливно-кислородных и топливно-воздушных смесей. Это задачи о распространении плоской детонационной волны по однородной смеси, задачи о распространении сферической детонационной волны и задачи о детонации сферического объема горючей смеси в воздухе.

Рассматриваются четыре стехиометрических смеси: водородно-кислородная смесь (продукты детонации состоят из H и O элементов), ацетилено-кислородная смесь (продукты детонации состоят из C, H и O элементов), водородно-воздушная смесь (продукты детонации состоят из H, N и O элементов) и ацетилено-воздушная смесь (продукты детонации состоят из C, H, N и O элементов).

Границы применимости модели химически равновесной смеси продуктов детонации определяются путем сравнения результатов термодинамического расчета и расчета, выполненного с учетом конечности скоростей химических реакций, протекающих в различных микрообъемах продуктов детонации.

На первом этапе все три задачи решаются в предположении, что в каждый момент времени в каждом микрообъеме продуктов детонации существует химическое равновесие. На втором этапе проверяется, протекают ли реакции в этих микрообъемах достаточно быстро, чтобы состав продуктов детонации действительно мало отличался от равновесного. Кинетическая схема для водородно-воздушной смеси включает в себя 28 элементарных стадий, схема для ацетилено-кислородной смеси - 216 элементарных стадий, схема для ацетилено-воздушной смеси - 325 элементарных стадий.

Результаты выполненных расчетов показывают, какую ошибку при решении этих задач дает модель химически равновесной смеси при различных начальных условиях. Для количественного представления этой ошибки сравнивается изменение массовой доли выбранного компонента смеси, полученное в кинетическом расчете, с таким же изменением, рассчитанным в предположении, что смесь имеет химически равновесный состав.

Расчеты показывают, что химическое равновесие устанавливается сначала среди молекул состоящих из C, H, O атомов. Но процесс установления равновесия происходит так, что число молекул не изменяется. Затем становятся близки скорости прямых и обратных реакций, в том числе реакций рекомбинации и диссоциации за исключением реакций, контролирующих процесс образования молекул NO.

Наибольшее влияние на характерное время установления химического равновесия оказывает реакция $H + OH + M \leftrightarrow H_2O + M$ для водородно-кислородной смеси и реакция $CO + O + M \leftrightarrow CO_2 + M$ для ацетилено-кислородной смеси.

Результаты расчетов позволяют сделать следующие выводы.

Для продуктов детонации топливно-кислородных смесей модель химически равновесной смеси обеспечивает хорошее согласие с кинетическим расчетом для всех встречающихся на практике начальных условий этих задач. Результаты расчета изменения концентраций по этой модели с удовлетворительной или высокой точностью согласуются с кинетическим расчетом для веществ, которые содержатся в смеси как в большом, так в и малом количестве.

Для продуктов детонации топливно-воздушных смесей модель химически равновесной смеси недостаточно точно описывает изменение содержания NO в рассматриваемых задачах для характерных расстояний менее 10м. Если реакции с азотосодержащими соединениями не рассматриваются, то модель обеспечивает получение результатов, сопоставимых по точности с кинетическим расчетом, для характерных расстояний более 1м для плоской и сферической автоматодельной волны разрежения и для начальных радиусов горючей смеси более 2м при детонации сферического заряда в воздухе.

Для всех рассмотренных задач модель химически равновесной смеси продуктов детонации лучше согласуется с кинетическим расчетом, чем модель смеси постоянного состава.

ПРОИЗВОДСТВО ЭНТРОПИИ В ЛАМИНАРНЫХ И ВИХРЕВЫХ ТЕЧЕНИЯХ

*Павлевич А.Л., Митрофанова О.В., Губин С.А.**

МИФИ, Москва

**gubin_sa@mail.ru*

Целью данной работы является исследование производства энтропии различных течений, в которых наблюдаются две устойчивых структуры – ламинарная и вихревая, при помощи численного моделирования. Были рассмотрены два вида течений – течение внутри коаксиальных цилиндров с образованием вихрей Тейлора и дозвуковое обтекание симметричного профиля крыла.

Численное моделирование проводилось с использованием программного комплекса ANSYS CFX, позволяющего проводить разнообразные гидрогазодинамические расчеты, как стационарные так и нестационарные, для плоских и трехмерных постановок задач. Для численных расчетов были построены трехмерная гексаэдрическая сетка для моделирования стационарного трехмерного течения между цилиндрами и двумерная гексаэдрическая сетка для моделирования стационарного двумерного обтекания профиля крыла. Численное моделирование проводилось для различных чисел Тейлора. В случае анализа течений внутри коаксиальных цилиндров, в широких пределах изменялись скорость вращения внутреннего цилиндра и вязкость жидкости. При дозвуковом обтекании симметричного профиля крыла изменялись скорость обтекания профиля и углы атаки.

По результатам компьютерного моделирования для этих задач были выявлены две структуры течения, наблюдаемые при различных параметрах течения. Для коаксиальных цилиндров были получены ламинарная структура

течения и вихревая, с образованием вихрей Тейлора. У профиля крыла – безотрывная структура обтекания профиля и полностью отрывная.

Переход от одной структуры течения к другой осуществлялся при достижении так называемых критических параметров. Для коаксиальных цилиндров таким критическим параметром оказалось число Тейлора, для профиля крыла – критический угол атаки α_{kr} .

Критическое значение $\alpha_{kr} = 41.3$, полученное при численном моделировании течения внутри коаксиальных цилиндров хорошо согласуется с экспериментально определенными величинами Такр, наблюдаемыми для перехода от ламинарной структуры течения к вихревой. Для низкой скорости обтекания профиля критическое значение $\alpha_{kr} \approx 14^\circ$.

При численном моделировании течений внутри коаксиальных цилиндров использовалась анизотропная модель турбулентности напряжений Рейнольдса (RSM, Reynolds Stress Model), для профиля крыла – модифицированная Ментером модель турбулентности $k-\omega$ (SST, Shear Stress Transport). Модели турбулентности определяли значение турбулентной вязкости жидкости.

Производство энтропии рассчитывалось как результат диссипации энергии за счет вязкости. По результатам расчетов были построены графики производства энтропии в зависимости от определяющих параметров (число Тейлора, угол атаки профиля крыла). На полученных графиках наблюдается скачок энтропии при переходе от одной структуры течения к другой.

В данной работе были использованы некоторые положения принципа минимума производства энтропии И. Пригожина [1]. В частности, гипотеза о том, что для каждой структуры течения есть своя функция производства энтропии во всем диапазоне определяющих параметров.

Ю.Л. Климонтович [2] доказал применимость принципа Пригожина для перехода ламинарного пограничного слоя, возникающего при обтекании пластины, в турбулентный пограничный слой при достижении критического числа Рейнольдса.

Данные численного моделирования по энтропии в окрестностях критических параметров были интерполированы полиномами $S(Ta)$ и $S(\alpha)$, которые затем дифференцировались, для получения функций $dS(Ta)$ и $dS(\alpha)$. Графики этих функций пересекались в окрестности критических параметров и демонстрировали подтверждение описанной выше гипотезы. Таким образом, можно выдвинуть предположение о том, что переход от одной структуры течения к другой определяется производством энтропии.

Литература

1. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. – М.: Прогресс, М., 1986, изд-во «Прогресс», 431 с.
2. Климонтович Ю. Л. Турбулентное движение и структура хаоса. – М.: Наука, 1990.-320 с.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН В КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВВ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА ПРОТОННОЙ РАДИОГРАФИИ

*Колесников С.А.^{*1}, Голубев А.А.², Демидов В.С.², Дудин С.В.¹, Камцырев А.В.², Лавров В.В.¹, Минцев В.Б.¹, Савченко А.В.¹, Смирнов Г.Н.², Турткизов В.И.², Уткин А.В.¹, Шестов Л.М.², Фортвов В.Е.¹, Шарков Б.Ю.²*

¹ИПХФ РАН, Черногловка, ²ГНЦ РФ ИТЭФ, Москва

*ksa@icp.ac.ru

Метод радиографического исследования вещества с использованием высокоэнергетических пучков заряженных частиц предоставляет уникальные возможности для получения прямой информации о распределении плотности вещества в оптически непрозрачных объектах непосредственно в условиях быстропротекающего динамического эксперимента. Важной особенностью радиографических измерений, проводимых на пучках, создаваемых ускорителями заряженных частиц, является также возможность многокадровой съемки в импульсном режиме. В случае исследования ударно-волновых и детонационных процессов это дает возможность определять их динамические параметры, такие, как скорость и пространственная структура волновых фронтов, массовая скорость вещества.

Соответствующие исследования детонационных волн в зарядах прессованного тринитротолуола (ТНТ) и эмульсионного ВВ (ЭВВ) проведены на протонно-радиографической установке, созданной на базе ускорителя ТВН-ИТЭФ [1]. Энергия пучка протонов составляла 800 МэВ, интенсивность – 10^{10} частиц на сброс, состоящий из четырех импульсов длительностью 70 ± 5 нс каждый с интервалом между импульсами 250 ± 15 нс. Регистрация изображений осуществлялась с помощью высокоскоростных цифровых фотокамер с привязкой к отдельному импульсу пучка протонов. Пространственное разрешение установки, измеренное в статических экспериментах, составляло в разных опытах от 300 до 50 мкм.

Для прессованного тротила проведено исследование зарядов плотностью от 1.30 до 1.63 г/см³ диаметром от 10 до 20 мм. Эксперименты с ЭВВ проводились для зарядов плотностью 1.07 г/см³ в полиэтиленовых оболочках с внутренним диаметром 15.6 и 20.0 мм. В опытах получены серии кадров двумерного распределения линейной плотности (т.е. плотности вдоль протонного луча) в детонационной волне. По картине распределения плотности определена форма и пространственная структура детонационных волн, кривизна их фронта, углы разлета продуктов детонации и оболочек зарядов. Результаты проведенных измерений показывают хорошую воспроизводимость от опыта к опыту, за исключением экспериментов с зарядами ЭВВ малого диаметра, что, по всей видимости, свидетельствует о том, что этот диаметр меньше критического диаметра детонации для ЭВВ данной плотности.

На основе полученного в эксперименте распределения линейной плотности проведено восстановление профилей объемной плотности на оси зарядов. Сравнительный анализ данных профилей с профилями массовой скорости, полученными для тех же зарядов с использованием лазерного доплеровского интерферометра VISAR, показал, что в профилях, полученных протонно-радиографическим методом, не удается зафиксировать структуру зоны химической реакции («химпика») вследствие размытия переднего фронта детонационной волны за время экспозиции кадра. В то же время, в окрестности точки Чепмена-Жуге и в последующей области разгрузки профили после соответствующего пересчета демонстрируют не только качественное, но и хорошее количественное совпадение. Это свидетельствует о том, что метод протонной радиографии позволяет получать в единственном динамическом эксперименте набор данных, с учетом уравнений газовой динамики полностью описывающий состояние вещества, претерпевшего детонационное превращение, что в будущем может дать основу для построения полных уравнений состояния продуктов детонации исследованных ВВ.

Работа поддержана госконтрактами №№Н.4е.4503101016 и Н.4т.4590101055.

1. А.А. Голубев, В.С. Демидов, Е.В. Демидова, С.В. Дудин, А.В. Канцырев, С.А. Колесников, В.Б. Минцев, Г.Н. Смирнов, В.И. Туртиков, А.В. Уткин, В.Е. Фортов, Б.Ю. Шарков // Письма в ЖТФ. 2010. Т.36. Вып.4, С.61-67.

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ ГЕТЕРОГЕННЫХ СМЕСЕЙ

Федоров А.В. , Фомин В.М.*

ИТПМ СО РАН, Новосибирск

**fedorov@itam.nsc.ru*

В первой части доклада приводятся результаты, полученные в течении ряда лет в ИТПМ СО РАН при теоретическом исследовании распространения детонационно-подобных режимов горения мелких реагирующих частиц (алюминия, угля) в кислороде в рамках математической модели механики двухскоростных двухтемпературных реагирующих гетерогенных сред. Изложение ведется для одномерных и двумерных нестационарных течений, где рассмотрены задачи о структуре детонационных волн в смесях: реагирующего газа и реагирующих частиц, алюминиевых частиц в кислороде, инертных частиц в реагирующем газе и т.п. Показано существование различных типов детонационных течений (идеальной и неидеальной детонации Чепмена-Жуге, слабой и сильной детонации). В рамках одномерного нестационарного подхода изучены вопросы устойчивости полученных режимов относительно их взаимодействия с догоняющей волной разрежения и проблемы инициирования детонации в смеси алюминиевых частиц и кислорода, где получено неплохое соответствие расчетных и экспериментальных значений энергии инициирования. Математическое моделирование в рамках двумерных нестационарных детонационных течений позволило обнаружить квазистационарные детонационные комплексы, возникающие при инициировании пристенных слоев газозвесей, ячеистую детонацию, для которой получена связь между характерным размером ячейки и радиусом частицы. Рассмотрены задачи о переходе гетерогенной детонации в каналах с разрывом сечения, где выявлены три сценария развития детонационного движения.

Во второй части доклада сообщается о решении проблемы подъема пылевых слоев под действием ударной волны (УВ), скользящей вдоль слоя, а также о ее одномерной аналогии лобовому взаимодействию УВ со слоем частиц расположенным вблизи от торца ударной трубы (проблема компактирования). В каждой из задач сообщается о выявленных механизмах подъема пыли, критериях реализации того или иного механизма компактирования смеси, верификации расчетной модели по литературным данным по зависимостям давления на стенке от времени.

Третья часть доклада посвящена математическому моделированию плавления и горения наноразмерных частиц алюминия.

ИЗМЕРЕНИЕ РАЗМЕРОВ НАНОЧАСТИЦ ПУТЕМ РЕГИСТРАЦИИ РАССЕЯНИЯ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

*Тен К.А.*¹, Титов В.М.¹, Прууэл Э.Р.¹, Толочко Б.П.², Жогин И.Л.², Лукьянчиков Л.А.¹*

¹ИГиЛ СО РАН, ²ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

**ten@hydro.nsc.ru*

Синхротронное излучение (СИ) от ускорителей заряженных частиц, как источник рентгеновского излучения, обладает рядом уникальных свойств, основными из которых являются большая интенсивность потока, позволяющая использовать очень малое время экспозиции (1 нс), высокая периодичность во времени (5-250 нс) и малая угловая расходимость источника. Эти свойства СИ позволяют получать многокадровую картину не только распределения плотности в ударных волнах и детонирующих ВВ, но и регистрировать дифракционные сигналы от образцов в области малых углов. Метод измерения мало-углового рентгеновского рассеяния (МУРР) широко применяется при анализе структуры нанодисперсных систем в статическом режиме. Использование высоко-периодичного синхротронного излучения от коллайдера ВЭПП-3 (Институт ядерной физики СО РАН) при измерениях МУРР с экспозицией 1 нс позволяет проследить эволюцию углового распределения МУРР в процессе детонации ВВ. Анализ динамики МУРР позволяет определить размеры образующихся частиц конденсированного углерода и изменение этих размеров во времени после прохождения детонационной волны. Эксперименты проводились с прессованными зарядами диаметром 15-20 мм из смесей тротила и гексогена, а также составов на основе ТАТБ

УДАРНОЕ СЖАТИЕ НАНОСТРУКТУРНОГО SiO₂ АЭРОГЕЛЯ

*Тен К.А.*¹, Ефремов В.П.², Беспалов Е.В.², Прууэл Э.Р.¹, Лукьянчиков Л.А.¹, Толочко Б.П.³,
Жогин И.Л.³*

¹ИГиЛ СО РАН, Новосибирск, ²ОИВТ РАН, Москва, ³ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

**ten@hydro.nsc.ru*

Необратимые процессы в конденсированных (сплошных, пористых) средах, происходящие при интенсивных внешних, в том числе ударно-волновых, воздействиях, являются одним из основных направлений исследований в области физики экстремальных состояний. Изучение таких процессов дает информацию о механических и термодинамических свойствах веществ, на которой основывается построение моделей поведения и уравнений состояния в максимально широкой области фазовой диаграммы. При этом особое внимание привлекают необратимое деформирование и разрушение, фазовые микроструктурные и мезоструктурные переходы, взаимодействие веществ с различными видами излучения. Разработанная и апробированная в Институте гидродинамики СО РАН совместно с Институтом ядерной физики методика исследования детонационных и ударно-волновых процессов с помощью синхротронного излучения (СИ) открыла новые возможности в получении информации о процессах и состояниях исследуемых сред в условиях экстремальных воздействий. В данной работе проведены исследования динамики деформирования высокопористого наноструктурного аэрогеля при ударно-волновом (алюминиевыми и медными ударниками со скоростями 1,5 – 3 км/с) и взрывном нагружении. Получены распределения плотности за фронтом ударной волны в аэрогеле и ударные адиабаты при начальной плотности 0,15-0,25 г/куб см. Работа проводилась

на станции исследования взрывных и ударно-волновых процессов Сибирского Центра синхротронного излучения.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ УГЛЕРОДА В ВОЛНАХ УДАРНОГО СЖАТИЯ И АДИАБАТИЧЕСКОГО РАСШИРЕНИЯ

Хищенко К.В.

ОИВТ РАН, Москва

konst@ihed.ras.ru

Для моделирования быстропротекающих процессов при высокой концентрации энергии необходимо знание свойств вещества, как в стабильных, так и метастабильных состояниях в широком диапазоне температур и давлений. Полиморфные модификации углерода (графит, алмаз и др.) обладают уникальными механическими и теплофизическими свойствами и являются основой материалов, которые широко используются в элементах конструкций, несущих высокие тепловые и силовые нагрузки. В настоящей работе развита полумпирическая модель уравнения состояния углерода с учетом полиморфных фазовых превращений, плавления и испарения. Проведены расчеты термодинамических характеристик графита, алмаза, жидкой и газовой фаз углерода в широком диапазоне давлений и температур. Выполнено сопоставление расчетных результатов с имеющимися ударно-волновыми данными. Полученное многофазное уравнение состояния углерода может быть эффективно использовано в численном моделировании процессов в конденсированном веществе при интенсивных импульсных воздействиях.

НЕРАВНОВЕСНЫЕ ПРОЦЕССЫ В РЕЛАКСАЦИОННОЙ ЗОНЕ УДАРНОЙ ВОЛНЫ В АРГОНЕ С МАЛОЙ ПРИМЕСЬЮ ГЕКСАКАРБОНИЛА МОЛИБДЕНА

Шумова В.В. , Зиборов В.С., Ефремов В.П.*

ОИВТ РАН, Москва

**shumova@ihed.ras.ru*

Наблюдаемые эффекты сверх-равновесного излучения и ионизации во фронте УВ, распространяющейся в лёгком инертном газе с малой примесью тяжёлых молекул [1], требуют получения недостающих данных о механизме распада примеси и образования малых кластеров вблизи фронта УВ. В работе проведено экспериментальное и численное исследование кинетики распада гексакарбонила молибдена и образования малых кластеров молибдена за слабыми ударными волнами (УВ), распространяющимися в аргоне.

Эксперименты выполнены на высоковакуумной ударной трубе диаметром 10 см «НЕФРИТ». Концентрация атомов молибдена, появляющихся в результате распада в УВ и убывающих вследствие образования кластеров молибдена, измерена методом атомной резонансной абсорбционной спектроскопии на длине волны 313.3 нм. Для упрощения анализа изучаемого механизма энергообмена во фронте УВ концентрация тяжёлых молекул и режимы экспериментов выбраны так, чтобы длины свободного пробега в соударениях между тяжёлыми молекулами были в 10÷100 раз больше длины поступательной релаксации инертного газа. В результате вклад соударений между тяжёлыми частицами вблизи фронта УВ становится мал и им можно пренебречь. Эксперименты выполнены при равновесных температуре и давлении за фронтом УВ 900÷1500 К и 0.5÷3.2 атм соответственно, при этом концентрация гексакарбонила молибдена в аргоне составляла $(0.5\div 1.2)\cdot 10^{-2}\%$. Измерения проведены за падающими и отражёнными УВ.

Полученные временные профили концентрации атомов молибдена использованы для отработки численной модели процесса распада исходного соединения и образования малых кластеров молибдена вблизи фронта УВ. Моделирование проведено с использованием пакета программ СНЕМКИН II. Термодинамические свойства продуктов распада гексакарбонила молибдена оценены на основе данных по энергиям связей $Mo - CO$ в ионе $Mo(CO)^+$ [2] и данных по термодинамике молекул $Fe(CO)_5$, исследованных детально в [3]. Получены распределения продуктов диссоциации гексакарбонила молибдена и распределения малых кластеров молибдена, образующихся в релаксационной зоне вблизи фронта УВ. Проведён совместный анализ экспериментальных данных и данных моделирования. Получены значения константы скорости распада гексакарбонила молибдена и образования димера молибдена Mo_2 . Установлено, что сечение реакции образования димеров молибдена не превышает газокинетического.

Показано, что наблюдаемые в [1] концентрации излучающих и ионизированных частиц вызваны неупругими процессами во фронте УВ. Получена оценка частоты таких неупругих соударений.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект №08-08-00890-а) и ПФИ ПРАН №2 "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества".

1. Ziborov V.S., Efremov V.P., Fortov V.E., Shumova V.V. // Proc. Int. Symp. on Shock Wave Interaction. Rouen. 2008. P.165-168.
2. Westmore J.B., Fisher K.J., Willet G.D. //Int. J. Mass Spectrometry. 1999. V.182/183. P.53-61.
3. Wen J.Z., Goldsmith C.F., Ashcraft R.W., Green W.H. // J. Phys. Chem. 2007. V.111. P.5677-5688.

**ПЫЛЕВЫЕ ОБРАЗОВАНИЯ В КРИОГЕННОЙ ПЛАЗМЕ ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА С
ПРОДОЛЬНОМ ГРАДИЕНТОМ ТЕМПЕРАТУРЫ**

Поляков Д.Н., Василяк Л.М., Шумова В.В., Петров О.Ф.*

ОИВТ РАН, Москва

**cryolab@ihed.ras.ru*

Охлаждение пылевой плазмы до криогенных температур приводит к уменьшению расстояния между пылевыми частицами и значительно увеличивает неидеальности плазмы [1]. При формировании пылевых облаков значительную роль играют термофоретические силы, вызванные температурными градиентами. Радиальная сила термофореза возникающая при увеличении энергетического вклада в плазму, приводит к изменению формы и положения пылевого облака [2]. С помощью продольного градиента температуры можно создавать тепловые ловушки [3]. Продольный температурный градиент должен изменять динамическую устойчивость пылевых частиц за счет изменения величины продольного электрического поля, величина которого будет зависеть от локальной плотности газа, определяемой его температурой.

В данной работе впервые экспериментально изучены пылевые структуры из частиц меламин-формальдегида диаметром 4,14 мкм в тлеющем разряде в неоне в диапазоне давлений 0,14-1,4 Тор ($T=295$ К) при охлаждении разрядного устройства до температуры жидкого азота. Разрядное устройство в виде стеклянной трубки длиной 200 мм с внутренним диаметром 16,5 мм с полым катодом и кольцевым анодом помещалось в оптический криостат, где оно плавно охлаждалось до температуры 77,4 К в потоке газа при испарении жидкого азота. Температура стенки разрядной трубки измерялась в трех точках: на половине ее длины, вблизи катода и анода. В эксперименте измерялись вольтамперные характеристики разряда и области положительного столба, где формировались пылевые структуры. Разность температур между точками измерения вольтамперной характеристики в положительном столбе была 20 К, а на максимальной по длине пылевой структуре - 2,5 К. Средний градиент температуры вдоль разрядной трубки при температуре катода 77,4 К составил 5,3 К/см. Оптическая регистрация свечения разряда и изображений пылевых частиц в рассеянном лазерном излучении проводилась посредством оптического микроскопа и видеокамер. Электрические и оптические измерения проводились с временной синхронизацией.

Воздействие на пылевую структуру углового температурного градиента при охлаждении разрядного устройства приводит к вращению пылевой структуры и ее смещению к холодной стенке. Наблюдаются колебания пылевых частиц с амплитудой более сотни микрон вдоль направления продольного электрического поля. При выравнивании температуры стенки трубки и температуры тяжелых компонентов плазмы и пылевых частиц, пылевая структура возвращалась к центру разрядной трубки и вращение частиц прекращалось, вертикальные колебания частиц при этом сохранялись. Амплитуда колебаний частиц зависела от давления и температуры газа. Начальное расстояние между пылевыми частицами в структуре при $T=295$ К и давлении 0,6 Тор было 140-310 мкм, зависело от тока разряда и сечения пылевой структуры. Значительное уменьшение расстояния между пылевыми частицами до 25-37 мкм при $T=77,4$ К зафиксировано при давлениях выше 0,6 Тор. Увеличение тока разряда приводило к уменьшению длины и увеличению диаметра пылевой структуры. Уменьшение давления газа при токах разряда менее 1,6 мА приводило к уменьшению числа частиц в пылевом образовании и расслоению их на плотные продольные нитевидные кластеры, состоящие из нескольких нитей, с расстояниями 125-150 мкм между кластерами и 25-40 мкм между частицами в нитях. Увеличение тока разряда сопровождалось плавлением кластеров и увеличением расстояний между частицами. Минимальное расстояние между пылевыми частицами близко к значению радиуса Дебая. Ток нормального тлеющего разряда при криогенной температуре ниже значений тока разряда при комнатной температуре и одинаковом значении давления газа.

1. В.Е. Фортов и др.// ДАН. 2002. Т.382.(1). С.50.
2. Л.М. Василяк и др.// ЖЭТФ. 2005. Т.127(5). С.1166.
3. Л.М. Василяк и др.// ЖЭТФ. 2003. Т.123(3). С.493.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ В ДВУХФАЗНОЙ ОБЛАСТИ

Орешкин В.И., Русских А.Г., Чайковский С.А.*

ИСЭ СО РАН, Томск

**oreshkin@hcei.tsc.ru*

В работе представлены результаты экспериментов электрическому взрыву проводников и проанализированы процессы образования и затухания страт. Описана методика оценки транспортных коэффициентов по скорости затухания страт. Показано, что в двухфазной области при характерных временах 10-7 с значения транспортных коэффициентов металлов не являются однозначной функцией состояния вещества, а зависят от предыстории процесса. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований гранты N 08-08-90418, N 09-08-00734-а.

**ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ДЛИННЫХ ГАЗОВЫХ
ПРОМЕЖУТКАХ**

Орешкин Е.В., Огинов А.В., Чайковский С.А., Шпаков К.В.*

ФИАН, Москва

**oreshkinev@scalpnet.ru*

Проанализированы результаты экспериментов по разряду в длинных газовых промежутках (50 см) в воздухе атмосферного давления на установке ЭРГ (ФИАН), обеспечивающей нарастание напряжения до 800 кВ за времена порядка 150-200 нс. В экспериментах на фронте напряжения зарегистрирован импульс рентгеновского излучения

в диапазоне энергий фотонов > 5 кэВ длительностью около 10 нс, который появлялся в процессе развития стримерного пробоя. Анализ экспериментальных результатов проводился с помощью численной модели, позволяющей определить длину катодного стримера, при которой на его «головке» реализуются условия убегания электронов, а так же рассчитать спектр тормозного излучения электронов. Расчетная длина стримера, при которой реализуются условия убегания, хорошо коррелирует с длиной стримера в момент генерации тормозного излучения, определенной в экспериментах. Кроме того, показано, что в разрядах высокого давления в условиях, реализуемых на установке ЭРГ, максимум спектра тормозного излучения лежит в районе 5-10 кэВ. Наличие максимума в спектре тормозного излучения обусловлено поглощением фотонов, испущенных электронами, атомами газа, в котором происходит разряд.

АНОМАЛЬНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ КОНДЕНСИРОВАННОГО МЕТАЛЛА И «ВЗРЫВНАЯ» ЭМИССИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Савватимский А.И.

ОИВТ РАН, Москва

komitet@iht.mpei.ac.ru

С. В. Лебедевым совместно с С. Э. Хайкиным было обнаружено интересное явление аномальной термоэлектронной эмиссии металла, возникающее при его быстром нагревании электрическим током большой плотности (10^6 А/см²). Эти аномалии проявляются в необычно большой величине электронной эмиссии металла в твердом состоянии вблизи точки плавления, а также в ее неравновесном характере: после резкого выключения нагревающего тока эмиссионный ток быстро спадает к своему обычному равновесному значению за время $\sim 10^{-4}$ с, в течение которого остыванием эмиттера можно пренебречь. Группой С.В.Лебедева в ОИВТ РАН было обнаружено неравновесное явление аномальной теплоемкости тугоплавких металлов (W, Ta, Mo, Nb) вблизи точки плавления, которое тесно связано с аномальной электронной эмиссией. Эти аномалии были объяснены неравновесной концентрацией точечных дефектов в металле, возникающей при его быстром нагревании со скоростью $\sim 10^9$ К/с [1].

Если расстояния между поверхностями разрыва становятся порядка длины пробега электрона (λ) в жидком металле (при достаточно больших расширениях), то следует ожидать резкого уменьшения и исчезновения металлической проводимости. Этому моменту соответствует начало «паузы тока» - резкое снижение или временное прекращение тока в электрической цепи. Поскольку для дробления металла на частицы размерами порядка λ не требуется разрушения всех связей между атомами, то металлическая проводимость может исчезать при энергии, недостаточной для полного испарения металла. Согласно литературным данным [2], для жидких натрия, меди, свинца при температуре плавления значения λ соответственно равны 157, 34, и 6 А. Эксперимент в ОИВТ РАН [1] показал, что размер частиц вольфрама при электрическом «взрыве» равен ~ 200 А (в начале «взрыва») и ~ 100 А (при окончании «взрыва»).

При автоэлектронной эмиссии используется катод в виде металлического острия. Кончик острия, нагреваемый автоэмиссионным током, в некоторый момент взрывается. Поэтому импульсное разрушение острия может рассматриваться как электрический взрыв проволоочки. Приведем цитату из [3]. «Взрывная» электронная эмиссия, как и электрический взрыв проводников, в своей основе имеют один и тот же источник выделения энергии – джоулев разогрев, приводящий в обоих случаях к электрическому взрыву металла». И далее: «Наблюдается интенсивное испускание электронов с катода, обусловленное взрывным переходом его материала из конденсированной фазы в плотную плазму (выделено автором доклада; именно так указано в формуле открытия) вследствие разогрева локальных областей при протекании собственного эмиссионного тока. Это явление получило название взрывной электронной эмиссии» [3]. Взрывная эмиссия принципиально отличается от автоэлектронной эмиссии тем, что при ней расходится материал эмиттера. «Переход металл — плазма инициируется взрывом металла, который чаще всего происходит за счет разогрева металла током автоэлектронной эмиссии большой плотности ($j = 10^8 - 10^9$ А/см²)». Согласно интерпретации авторов открытия наличие плотной плазмы вблизи поверхности металла, которая вытягивает электроны из катода, однозначно определяет взрывную электронную эмиссию. Следует подчеркнуть, что независимо от признания той или иной причины взрывной электронной эмиссии, ее использование и дальнейшая ее разработка коллективом академика Г.А.Месяца привела к появлению новых эффективных ускорителей. Фактически была создана новая отрасль электронной промышленности, поэтому надо отдать должное успешной деятельности ученых под руководством Г.А.Месяца. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 08-10-00114а.

[1] С.В.Лебедев, А.И.Савватимский, Об исчезновении электропроводности металла вследствие сильного нагревания электрическим током большой плотности, ТВТ. Т.8. №3. С.524-531. 1970.

[2] Н.Мотт, Электроны в неупорядоченных структурах, «Мир», 1969.

[3] Г.А.Месяц, Д.И.Проскуровский, «Импульсный электрический разряд в вакууме» «Наука», Новосибирск, 1984.

ФЛУКТУАЦИИ ДАВЛЕНИЯ В НЕИДЕАЛЬНОЙ НЕВЫРОЖДЕННОЙ ПЛАЗМЕ

Сайтов И.М., Норман Г.Э., Ланкин А.В.*

ОИВТ РАН, Москва

**saitov_06@mail.ru*

Предположение о плазменном фазовом переходе (ПФП) было выдвинуто в [1,2] по аналогии с уравнением ван-дер-Ваальса, в котором фазовый переход первого рода возникает в результате конкуренции дальнего притяжения и короткодействующего отталкивания. Кулоновское взаимодействие между зарядами является дальнедействующим и, в силу поляризации их расположения в плазме, имеет в целом характер притяжения. Эффективное отталкивание на малых расстояниях возникает даже между электроном и протоном из-за квантовых эффектов. В отличие от неидеального газа, в низкотемпературной плазме присутствуют возбужденные атомы. Ограничение дискретного спектра в статистической сумме атома зависит от концентрации зарядов. Грязнов и

Иосилевский [3,4] обратили внимание на то, что эта зависимость приводит к появлению в уравнении состояния нового слагаемого, имеющего характер эффективного отталкивания. Этот фактор может повлиять и на ПФП.

В [3,4] использовалась химическая модель плазмы. Более последовательным представляется применить флуктуационный подход [5], позволяющий производить самосогласованное совместное описание слабо связанных и свободных электронных состояний без их разделения. Используется метод молекулярной динамики. В качестве потенциала взаимодействия электронов и ионов выбирается кулоновский, обрезанный на глубине, не зависящей от концентрации и температуры частиц. При анализе флуктуаций давления была обнаружена область параметров однократно ионизованной неидеальной плазмы, в которой функция распределения давления может быть довольно точно описана суперпозицией двух нормальных распределений, а также области температур и плотностей зарядов в которых мгновенные значения давления могут принимать отрицательные значения, хотя при этом среднее значение давления всегда положительно. Следует заметить, что данные области параметров находятся вне области действия вышеупомянутого стабилизирующего фактора. Таким образом, полученный результат может служить косвенным указанием на существование двухфазной области в этом диапазоне параметров плазмы.

1. Норман Г.Э., Старостин А.Н. // ТВТ. 1968. Т.6. С.410.
2. Норман Г.Э., Старостин А.Н. // ТВТ. 1970. Т.8. С.413.
3. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Серия Б. Том III-I (под ред. Фортова В. Е.) М.: Физматлит, 2004.
4. Каклюгин А.С., Норман Г.Э. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Серия Б. Том III-I (под ред. Фортова В. Е.) М.: Физматлит, 2004.
5. Lankin A.V., Norman G. E.// J. Phys. A: Mathematical and Theoretical. 2009. V.42. P.214032.

РАЗОГРЕВ ВЕРТИКАЛЬНОГО И ГОРИЗОНТАЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ СИСТЕМЫ ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ В ПЛАЗМЕ ГАЗОВОГО РАЗРЯДА

Тимофеев А.В.

ОИВТ РАН, Москва

timofeevalv1@gmail.com

Сформулирована система уравнений движения пылевых частиц в приэлектродном слое газового разряда с учётом флуктуаций заряда пылевой частицы и особенностей приэлектродного слоя разряда. Проведено молекулярно-динамическое моделирование системы пылевых частиц. Исследована связь параметра неидеальности, кинетической температуры и среднего межчастичного расстояния системы пылевых частиц. Проанализированы причины отклонения кинетической температуры, полученной с помощью моделирования, от теоретической оценки. Обсуждается применимость термина "температура" к системе пылевых частиц. Предложен механизм увеличения средней кинетической энергии пылевых частиц в газоразрядной плазме. Показано, что флуктуации заряда вызывают вынужденные колебания, которые разогревают вертикальные колебания пылевых частиц. Механизм передачи энергии от вертикальных колебаний к горизонтальным основан на явлении параметрического резонанса. Он возникает из-за пересечения диапазона собственных частот горизонтальных колебаний пылевых частиц с диапазоном собственных частот вертикальных колебаний пылинок в приэлектродном слое газового разряда. Комбинация параметрического и вынужденного резонансов позволяет объяснить anomalously высокие значения кинетической энергии пылевых частиц. Оценки частоты, амплитуды и кинетической энергии пылевых частиц близки к экспериментальным значениям.

ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОЛОЖИТЕЛЬНОГО СТОЛБА ТЛЕЮЩЕГО РАЗРЯДА С ПЫЛЕВЫМИ ЧАСТИЦАМИ

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

ОИВТ РАН, Москва

**shumova@ihed.ras.ru*

Плазма с конденсированной дисперсной фазой широко используется в различных технических устройствах. Присутствие в плазме частиц изменяет как локальные свойства плазмы, так и нелокальные характеристики разрядов и других плазменных устройств. Локальные изменения, индуцируемые в плазме пылевыми частицами, изучены достаточно подробно. При этом исследование и моделирование изменения нелокальных параметров плазмы в присутствии пылевых структур практически не проводились. Вброс в плазму газового разряда пылевых частиц и формирование их структур изменяет не только радиальные распределения компонентов плазмы, и следовательно, радиальное распределение поля, но и продольное поле разряда, приводя к новому равновесному состоянию разряда. Эти вопросы особенно актуальны при высоких плотностях пылевых частиц, что имеет место, например, при криогенных температурах [1], либо в системах с большим числом частиц в исследуемом объеме, что наблюдалось в условиях микрогравитации [2]. Таким образом, моделирование измеряемых характеристик плазмы, сопоставление и интерпретация на их основе данных экспериментов является актуальной задачей.

В данной работе проведен расчет измеряемых нелокальных параметров плазмы положительного столба тлеющего разряда (ПС ТР) постоянного тока в присутствии пылевых структур с различной концентрацией пылевых частиц. Такая постановка является шагом к нелокальному самосогласованному описанию плазмы с конденсированной дисперсной фазой.

Расчеты проведены для условий, типичных для ПС низкоточного ТР низкого давления в воздухе, в которых реализуется столкновительный режим поддержания разряда. Плазма разряда описывается в рамках диффузионного приближения [3], а пылевая компонента - в приближении OML. Математическая формулировка модели в данной постановке и метод решения изложены ранее в работе [4].

Расчет выполнен для частиц микронного размера с концентрациями до 10^{11} см⁻³. Распределение частиц по радиусу трубки задавалось размытой ступенчатой функцией с параметрами, не зависящими от параметров разряда. Получены распределения по радиусу ПС компонента плазмы и радиальной составляющей поля. Рассчитаны заряды частиц при различных концентрациях последних и параметров разряда. Показано, что при достижении

некой достаточной концентрации частиц эффективность поглощения частиц плазмы поверхностью пылевых частиц становится сравнимой с диффузионными потерями на стенках трубки.

Проанализировано влияние пылевого облака на конфигурацию электрического поля при различных концентрациях пылевых частиц. Рассчитаны вольт-амперные характеристики разряда. Получено количественное согласие с экспериментальными данными работы [5] при соответствующих комбинациях концентраций пылевых частиц и тока разряда. Показана более высокая устойчивость разряда к возмущающему действию пылевых частиц при более высоких значениях тока разряда.

Работа поддержана ПФИ ПРАН №2 "Теплофизика и механика экстремальных энергетических воздействий и физика сильно сжатого вещества".

1. Василяк Л.М., Ветчинин С.П., Зимнухов М.С., Нефедов А.П., Поляков Д.Н., Фортов В.Е. // ДАН. 2002. Т.382. С.50.
2. Fortov V.E., Morfill G.E. Complex and Dusty Plasmas. From Laboratory to Space. CRC Press. 2009.
3. Райзер Ю.П. Физика газового разряда. - М:Наука. 1992. 536 с.
4. Шумова В.В., Василяк Л.М., Поляков Д.Н. // Сб. тез. 7-го Росс. Симп. «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах». Н. Афон, 23 июля – 1 августа 2009 г. С.17-18.
5. Балабанов В.В., Василяк Л.М., Поляков Д.Н. и др. // ЖЭТФ. 2001. Т.119(1). С.99-106.

**ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ ПРОБОЯ ПРОЗРАЧНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ
НАНОСЕКУНДНЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ**

*Савицьев А.П.^{*1}, Гавашели Д.Ш.², Гавашели Ю.О.¹*

¹КБГУ, ²НИИ ПМА КБНЦ РАН, *Нальчик*

**pnr@kbsu.ru*

Лазерное излучение высокой интенсивности может приводить к разрушениям прозрачных твердых тел. Исследования подобных явлений крайне важны для стекол, органических диэлектриков и кристаллов. Такие среды являются неотъемлемыми элементами самих лазеров (активные элементы, подложки зеркал), нелинейных преобразователей лазерного излучения, систем транспортировки и формирования пучков лазерного излучения (призмы, линзы и т.д.).

Разрушения, возникающие в прозрачных телах под действием наносекундных лазерных импульсов, наиболее целесообразно разделить на разрушения, возникающие в идеальной чистых средах, и разрушения, обусловленные примесями [1]. Согласно этому подходу, различают порог несобственного лазерного пробоя, обусловленный разрушением на дефектах, примесях, включениях, и порог собственного пробоя, определяемый лучевой стойкостью предельно чистого вещества.

Для лучевого пробоя прозрачных твердых тел короткими лазерными импульсами имеет место определенная зависимость порога лучевого разрушения от длительности импульса. Исследование характера подобной зависимости, помогает понять механизмы и закономерности лазерного пробоя в различных материалах.

На основе экспериментальных данных [2] с использованием компьютерной программы математического моделирования Matlab 7 изучена база данных зависимости порога лазерного разрушения I в SiO_2 от длительности импульса τ : 1- для лазерных импульсов прямоугольной формы и 2- для лазерных импульсов гауссовой временной формы.

1 – $\lambda = 1.05$ мкм, $D_n = 7.2$ мкм, $I_{th} = 0.8$ ТВт/см² ($\tau < 40$ нс); $\lambda = 0.53$ мкм, $D_n = 5.0$ мкм, $I_{th} = 0.75$ ТВт/см² ($\tau > 40$ нс); 2 – $\lambda = 1.05$ мкм, $D_n = 5.0$ мкм, $I_{th} = 0.75$ ТВт/см².

(λ – длина волны лазерного излучения, D_n – диаметр фокального пятна сфокусированного излучения на уровне e^{-1} от максимальной интенсивности в центре пучка, I_{th} – пороговая интенсивность разрушения для непрерывного излучения). По данным построено две кривые.

Нами было установлено, что приближение данных наиболее адекватно проводится с использованием параметрической степенной модели $f(x) = ax^b$. Проведено приближение данных стандартными параметрическими и непараметрическими моделями. Программа Matlab 7 позволяет за короткое время "проиграть" с помощью изменения параметров различные конструктивные модели и избежать принципиальных ошибок.

Для данных, аппроксимируемых кривой 1, имеем коэффициенты: $a = 1.09$ и $b = -0.56$; для данных, аппроксимируемых кривой 2, получили $a = 2.75$ и $b = -0.56$.

Поскольку согласно нашим расчетам $b \sim \sqrt{\tau}$, то в изучаемом диапазоне τ (наносекундные импульсы) должна хорошо работать теория механизма теплового взрыва включений [2], то есть имеет место несобственный пробой.

Построение аналогичных зависимостей в пикосекундном и фемтосекундном диапазоне длительностей лазерного импульса позволит нам в дальнейшем оценить механизмы разрушения прозрачных твердых тел для ультракоротких лазерных импульсов.

1. Делоне Н.Б. Взаимодействие лазерного излучения с веществом. М. Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. 280 с.
2. Маненков А.А. Квантовая электроника. 2003. Т. 33. № 7. С. 639.

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА СУБ-РЕЛЯТИВИСТСКОЙ
ИНТЕНСИВНОСТИ С МИКРОСТРУКТУРИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ЖИДКОГО
МЕТАЛЛА**

*Иванов К.А.^{*1}, Урюпина Д.С.¹, Волков Р.В.¹, Савельев А.Б.¹, Брантов А.В.², Быченков В.Ю.²,
Ерёмин Н.В.³, Пасхалов А.А.³*

¹МГУ, ²ФИАН, ³НИИЯФ МГУ, *Москва*

**iv_konst_an@rambler.ru*

Нами исследованы особенности взаимодействия лазерного импульса суб-релятивистской интенсивности с поверхностью жидкого металла. Наши эксперименты показали, что воздействуя на мишень лазерным импульсом с предымпульсом, опережающим основной импульс на несколько наносекунд, можно добиться существенного роста выхода жёсткого рентгеновского излучения и энергии горячих электронов в плазме за счёт формирования периодически расположенных микроструктур на поверхности вещества.

В экспериментах в качестве источника лазерного излучения использовался лазер на кристалле Ti:Sa (длительность импульса – 55 фс, длина волны – 800 нм, энергия импульса – 1 мДж, частота повторения – 10 Гц, интенсивность – 410^{16} Вт/см²). В качестве мишени использовался расплавленный галлий при температуре 300°С. В экспериментах с частотой повторения импульсов в 1кГц использовалась другая лазерная система на кристалле Ti:Sa с аналогичными параметрами, но большей частотой повторения импульсов (100 до 1000 Гц).

Нами обнаружено, что использование импульса с предымпульсом, опережающим основной на несколько наносекунд и имеющим энергию от 10^{-6} до 10^{-1} от энергии основного импульса, существенно влияет на генерацию горячих электронов и выход жёсткого рентгеновского излучения. Так при энергии предымпульса 50^{-1} от энергии основного импульса выход жёсткого рентгеновского излучения увеличивается в 60 раз, а средняя энергия горячих электронов в плазме растёт почти в 4 раза (с 20 до 75 кэВ) по сравнению со случаем импульса без предымпульса. Происходит также возбуждение линейчатых компонент плазмы, соответствующих К-альфа (9.3 кэВ) и К-бета (10.3 кэВ) линиям галлия. Кроме того, параметры плазмы не зависят от направления линейной поляризации лазерного импульса.

Оптическая диагностика облака плазмы показала, что под воздействием предимпульса происходит формирование периодически расположенных микроструктур в виде струй, вылетающих из плотной части плазмы, размер которых в зависимости от энергии предимпульса изменяется от единиц до десятков мкм.

Численное моделирование лазерно-плазменного взаимодействия показало, что наличие на поверхности мишени микроструктур в виде ряда «игл», имеющих диаметр в несколько микрон и длину в 10-20 мкм, приводит к эффективному ускорению электронов вдоль поверхности этих игл в направлении к поверхности металла. Это приводит к существенному росту средней энергии горячих электронов в плазме и, как следствие, к увеличению выхода рентгеновского излучения. Сильное искривление поверхности мишени также обуславливает независимость параметров плазмы от поляризации лазерного импульса.

Нами также показано, что использование расплавленного металла в качестве мишени устраняет необходимость сдвигать мишень после каждого лазерного выстрела и сильно упрощает конструкцию мишенного узла. Исследования стабильности работы нашего источника при частоте повторения лазерных импульсов 1кГц показали, что без дофокусировки такой источник остаётся стабильным около полуминуты, а при дополнительной фокусировке – до нескольких часов непрерывной работы.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГАЗА АДРОНОВ С ПОПРАВКОЙ ВАНДЕРВААЛЬСОВА ТИПА И ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД К КВАРК-ГЛЮОННОЙ ПЛАЗМЕ

Князев Н.С. , Хищенко К.В.*

ОИВТ РАН, Москва

**knyazev.n@gmail.com*

Применение релятивистских ускорителей заряженных частиц для генерации экстремальных состояний вещества в контролируемых условиях определяет интерес к экспериментальному и теоретическому исследованию систем с сильным межчастичным взаимодействием [1, 2]. При релятивистских столкновениях элементарных частиц или ионов может образовываться кварк-глюонная плазма и адронный газ. Вследствие актуальности широкого круга задач, связанных с динамикой таких систем, возникает необходимость расчета уравнений состояния для многокомпонентного газа адронов и плазмы кварков и глюонов.

Фаза адронного газа в цепочке превращений при релятивистских столкновениях является наиболее изученной. Существует ряд статистических моделей, базирующихся на рассмотрении законов сохранения зарядов адронной смеси и хорошо зарекомендовавших себя в описании термодинамических свойств и состава получаемого газа адронов. В настоящей работе для расчета уравнения состояния адронного газа используется большой канонический ансамбль с поправками вандерваальсова типа на конечный размер адронов [3, 4]. Уравнение состояния для кварк-глюонной фазы описывается с использованием модели мешков MIT [4–7], в которой плазма состоит из безмассовых глюонов, легких кварков и странных кварков с ненулевой массой. В предположении сохранения барионного заряда и странности рассчитаны параметры химического равновесия для смеси из 100 сортов адронов. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными [8, 9]. Также определены параметры фазового перехода адронный газ – кварк-глюонная плазма.

1. Фортов В. Е., Хоффманн Д., Шарков Б. Ю. // УФН. 2008. Т. 178. № 2. С. 113–138.
2. Фортов В. Е. Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008.
3. Andronic A., Braun-Munzinger P., Stachel J. // Phys. Lett. B. 2009. V. 673. N. 2. P. 142–145.
4. Satarov L. M., Dmitriev M. N., Mishustin I. N. // Phys. Atom. Nucl. 2009. V. 72. N. 8. P. 1390–1415.
5. Ivanov Yu. B., Khvorostukhin A. S., Kolomeitsev E. E., Skokov V. V., Toneev V. D., Voskresensky D. N. // Phys. Rev. C. 2005. V. 72. P. 025804.
6. Satarov L. M., Mishustin I. N., Merdeev A. V., Stocker H. // Phys. Rev. C. 2007. V. 75. P. 024903.
7. Satarov L. M., Mishustin I. N., Merdeev A. V., Stocker H. // Phys. Atom. Nucl. 2007. V. 70. N. 8. P. 1773–1796.
8. Afanasiev S. V. et al. // Phys. Rev. C. 2002. V. 66. P. 054902.
9. Alt C. et al. // Phys. Rev. C. 2008. V. 77. P. 024903.

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕПЛОЗАЩИТНОГО МАТЕРИАЛА РТП-200 ПРИ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ТЕПЛОВЫХ НАГРУЗКАХ

*Петровский В.П.*¹, Веревкишко П.С.¹, Сенченко В.Н.¹, Семененко В.Н.², Шейндлин М.А.¹*

¹ОИВТ РАН, ²ОИВТ РАН, Москва

**petrovskiy@ihed.ras.ru*

Экспериментально исследовано влияние последствий высокотемпературного аэродинамического нагрева на электрофизические характеристики элементов конструкций ракетно-космической техники (РКТ). Под действием высокоинтенсивных аэродинамических нагрузок конструкционные элементы РКТ подвергаются нагреву, оплавлению, испарению, абляции, эти процессы приводят к структурным превращениям в поверхностных слоях материала корпусов. Подобные превращения могут существенно изменить электрофизические характеристики материала РТП-200 и коэффициент затухания радиосигнала в корпусе конструкции. Экспериментальные исследования затухания СВЧ сигнала, вносимого корпусом радиопрозрачного элемента конструкции, изготовленного из материала РТП-200 в диапазоне частот ГЛОНАСС навигации (1,2...1,6) ГГц в исходном состоянии, а также после траекторного нагрева, проводились в три этапа. На первом этапе определялась величина затухания радиосигнала, вносимого пластиной из материала РТП-200 в исходном состоянии. Для измерения диэлектрических свойств образцов использовался экспериментальный стенд на основе широкополосного векторного анализатора электрических цепей R&S ZVA24 с линзовыми рупорными антеннами. Квазиоптическая методика измерений основывалась на измерении частотной зависимости комплексного коэффициента прохождения электромагнитной волны через образец, расположенный между двумя рупорами с использованием временной селекции паразитных переотражений в тракте. На втором этапе методом физического моделирования имитировался траекторный нагрев образца излучением непрерывного лазера, $\lambda = 1064$ нм, диапазон мощностей (200-3300) Вт. На третьем этапе определялась величина

затухания радиосигнала, вносимого образцом из материала РТП-200 после физического моделирования траекторного нагрева. В ходе исследований установлено, что затухание сигнала при прохождении материала образца РТП-200 в диапазоне частот ГЛОНАСС навигации (1,2...1,6) ГГц увеличилось примерно на 1 дБ. Увеличение затухания сигнала связано с образованием на поверхности образца неоднородного полупроводящего углеродосодержащего слоя, образованного в результате лазерного облучения, моделирующего аэродинамический нагрев.

РАСЧЁТ КИЛЬВАТЕРНОГО ПОЛЯ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА НА ПЛАЗМУ МЕТОДОМ PIC

Пугачёв Л.П. , Левашов П.Р.*

ОИВТ РАН, Москва

**pugachev@ihed.ras.ru*

Кильватерное поле, возникающее при воздействии на плазму короткого лазерного импульса, может служить механизмом эффективного ускорения электронов. Нами получено распределение кильватерного поля при распространении лазерного импульса с длиной волны ~ 1 мкм и интенсивностью $\sim 10^{19}$ Вт/см² в плазме водорода с плотностью $\sim 10^{19}$ см⁻³. Полученные результаты могут быть использованы для изучения ускорения электронов в таких полях. Для расчёта использовалась программа OOPIC Pro, которая реализует метод PIC (Particle-in-Cell) для моделирования плазмы на кинетическом уровне и с учетом релятивистских эффектов.

БАЗА ДАННЫХ SPECTR-W³ ДЛЯ СПЕКТРОСКОПИИ ПЛАЗМЫ И ДРУГИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

*Скобелев И.Ю.*¹, Фаенов А.Я.¹, Пижух Т.А.¹, Лобода П.А.², Магунов А.И.³*

¹ОИВТ РАН, Москва, ²РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск, ³ИОФ РАН, Москва

**skobelev@izmaylovo.ru*

Прогресс во многих направлениях научных исследований и перспективных разработок в области высоких технологий в значительной мере зависит от наличия надежных атомных данных — информации по фундаментальным свойствам электронной структуры атомных систем и по элементарным процессам, протекающих с их участием. На основе этих данных, например, совершенствуются средства диагностики плазмы (УТС, физика высоких плотностей энергии, астрофизика), разрабатываются малогабаритные источники рентгеновского и ВУФ излучений высокой яркости (новые технологии высокоточной обработки и отображения в микролитографии, наноэлектронике, изучении кинетики химических реакций, цитологии, микрохирургии). Потребности систематического сбора, должной интерпретации такой информации, возможность эффективного использования больших наборов атомных данных в прикладных целях, привели к созданию специализированных баз атомных данных, причем в последние годы многие из них стали доступны на соответствующих Web-сайтах.

Еще в 1988–95 гг. в авторами настоящей работы была разработана фактографическая база атомных данных СПЕКТР, аттестованная ВНИЦСМВ Госстандарта РФ для промышленной эксплуатации в качестве базы стандартных справочных данных (Атт. № ГСССД БД-10-2000). На основе АБД СПЕКТР в 2001–2003 гг. была создана информационно-справочная система SPECTR-W³, реализованная в виде интерактивного Web-ресурса. В настоящее время АБД SPECTR-W³ является крупнейшей в мире фактографической базой данных по свойствам спектров многозарядных ионов и включает данные расчетов, измерений и компиляций как по спектроскопическим характеристикам изолированных ионов (потенциалы ионизации, уровни энергии, длины волн, вероятности и силы осцилляторов радиационных переходов, вероятности автоионизации), так и сечениям и скоростям электрон-ионных, ион-ионных и фотон-ионных столкновений. Эти данные взяты из публикаций в ведущих физических журналах, из специализированных публикаций по атомным данным, или получены непосредственно авторами настоящей работы.

Web-сайт SPECTR-W³ (<http://spectr-w3.snz.ru>) работает в сети World-Wide Web с мая 2002 г. в режиме свободного круглосуточного доступа и включен в реестр специализированных баз данных по атомной физике и физике плазмы (<http://plasma-gate.weizmann.ac.il/DBfAPP.html>). В настоящее время Web-ресурс SPECTR-W³ обслуживает более 50 сеансов посещения в день с компьютеров университетов, научных центров и исследовательских лабораторий различных стран мира. Рядом специалистов используется и полнофункциональная локальная версия базы данных, разработанная для автономной работы на персональных компьютерах, установочный пакет которой доступен для некоммерческого использования на Web-сайте АБД SPECTR-W³.

Работа по созданию АБД SPECTR-W³ поддерживалась в разные годы грантами МНТЦ 1785 и 3504, а в настоящее время - грантом РФФИ 10-07-00227-а.

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В МЕТАЛЛАХ ПРИ НЕРАВНОВЕСНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ

Сергеев О.В. , Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва

**seoman@yandex.ru*

Взаимодействие коротких мощных лазерных импульсов или пучков ионов с веществом может приводить к формированию особого состояния вещества, известного как warm dense matter [1]. При этом сразу после воздействия возникает неравновесная система кристаллической решетки, температура ионов которой практически равна начальной, и электронов с температурой до нескольких эВ. Эволюция такой системы напрямую зависит от скорости обмена энергией между электронной и решеточной подсистемами, то есть от так называемого фактора электрон-фононного взаимодействия.

В данной работе с помощью методов теории функционала электронной плотности определяются зависимости фактора электрон-фононного взаимодействия от начальной электронной температуры для Al, Ag и W. Интенсивность электрон-фононного взаимодействия определяется видом функций плотности электронных и фононных

состояний [2], они рассчитываются с помощью пакетов VASP [3], Quantum Espresso [4] и утилиты PHON [5]. Показано, что изменение электронной и фононной плотностей состояний дает существенную поправку к фактору электрон-фононного взаимодействия при начальных электронных температурах выше 1-2 эВ.

1. Ralph Ernstorfer et al. // Science 2009. V.323. P.1033-1037.
2. Leonid V. Zhigilei et al. // Phys. Rev. B 2008. V.77. P.075133-1 - 075133-17.
3. G. Kresse and J. Hafner. // Phys. Rev. B 1993. V.47. P.558-561.
4. Paolo Giannozzi et al. // J. Phys.: Cond. Matt. 2009. V.21 395502
5. D. Alfe. // Comp. Phys. Comm. 2009. V.180. P.2622-2633.

КОЛИЧЕСТВЕННОЕ СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПОЛНОЭЛЕКТРОННЫХ И ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЬНЫХ РАСЧЕТОВ ТЕПЛОЕМКОСТИ И ДАВЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ С ПОКОЯЩИМИСЯ ЯДРАМИ

*Левашов П.Р.¹, Синько Г.В.*², Смирнов Н.А.², Хищенко К.В.¹*

¹ОИВТ РАН, Москва, ²РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск

*gevas@uniterra.ru

В последнее время возник интерес к системам, представляющим собой кристалл, в котором электронная подсистема имеет конечную температуру, а ядра остаются "холодными". Этот интерес вызван исследованиями воздействия излучения фемтосекундного лазера на вещество. При таком воздействии электроны практически мгновенно нагреваются до температуры в несколько электрон-вольт, а передача энергии ядрам идет относительно медленно, так что некоторое время их можно считать холодными.

Поэтому к кристаллам, подвергнутым воздействию излучения фемтосекундного лазера, на начальном этапе процесса установления равновесия могут быть применены методы расчета электронной структуры, разработанные для случая нулевых температур. Эти методы, как известно, делятся на две большие группы – полнопотенциальные методы и методы, использующие псевдопотенциал и плоские волны в качестве базиса. И те, и другие широко используются на практике. Но поскольку введение псевдопотенциала есть приближение, то важно количественно определить границы применимости этого приближения для рассматриваемой задачи. С этой целью для кристаллов Na, Al, K, и W двумя методами были рассчитаны электронная теплоемкость при нормальной плотности и покоящихся ядрах для различных температур электронов, а так же давление в зависимости от сжатия при температуре электронов и ионов, равной нулю. Один из этих методов, метод FP-LMTO [1], является полноэлектронным методом расчета электронной структуры. Другой метод, VASP [2,3,4], использует псевдопотенциалы, принадлежащие к популярному в настоящее время классу ультрамягких псевдопотенциалов.

Приведенные в докладе результаты расчетов количественно иллюстрируют качественные заключения о том, что при использовании современных псевдопотенциалов, связанная с ними погрешность определяется числом электронов, включенных в кор, и степенью термического возбуждения внешних электронов.

1. S. Yu. Savrasov, Phys. Rev. B. **54**, 16470 (1996).
2. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993); **49**, 14251 (1994).
3. G. Kresse, J. Furthmuller, Comput. Mat. Sci., **6**, 15 (1996).
4. G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТОВ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ФЕМТОСЕКУНДНУЮ АБЛЯЦИЮ ЗОЛОТА: ОТ КВАНТОВЫХ РАСЧЕТОВ К АТОМИСТИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ

*Стариков С.В., Стегайлов В.В.**

ОИВТ РАН, Москва

**stegailov@gmail.com*

Представлены результаты разработки потенциала межатомного взаимодействия для золота, позволяющего учитывать влияние электронной температуры на межатомное взаимодействие в золоте в диапазоне T_e до 6 эВ. Проведено атомистическое моделирование абляции золота в фемтосекундном режиме. Показано, что учет двухтемпературности на начальной релаксации материала мишени после лазерного энерговклада приводит к возникновению специфического режима абляции.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ НА МЕТАЛЛИЧЕСКУЮ ФОЛЬГУ: ГИДРОДИНАМИЧЕСКИЙ И КОМБИНИРОВАННЫЙ ПОДХОДЫ

Фокин В.В. , Левашов П.Р., Поварницын М.Е., Хищенко К.В.*

ОИВТ РАН, Москва

**Vladimir.Fokin@phystech.edu*

В работе проводится численное моделирование воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на металлическую фольгу. Используются два подхода: двухтемпературная односкоростная гидродинамическая модель [1] и комбинированная модель [2], основанная на методе молекулярной динамики для ионов и решении уравнения теплопроводности для электронов. В этих двух моделях учитывается электрон-фононное взаимодействие и электронная теплопроводность. В гидродинамической модели используется двухтемпературное многофазное уравнение состояния, а в комбинированной модели свойства вещества описываются эффективным потенциалом взаимодействия внедренного атома. В обоих моделях пренебрегается ионизацией вещества.

Гидродинамическая модель корректно описывает поглощение лазерного излучения и эволюцию параметров электронной и ионной подсистем, но достаточно грубо воспроизводит процесс разрушения вещества фольги. Комбинированная модель, с другой стороны, не учитывает вклад электронов в давление, а также кинетическую энергию электронов, но достаточно реалистично показывает дефрагментацию фольги. В работе анализируются результаты, полученные двумя методами, на примере алюминия. Предлагаются подходы для дальнейшего совершенствования двухтемпературной модели.

1. M.E. Povarnitsyn, T.E. Itina, M. Sentis, K.V. Khishchenko, P.R. Levashov // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P. 235414.
2. D.S. Ivanov, L.V. Zhigilei // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 064114.

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ БЕЛКОВ С УЧЕТОМ
ИОНИЗАЦИОННО-КОНФОРМАЦИОННОЙ СВЯЗИ И РАВНОВЕСНОГО ТИТРОВАНИЯ

Воробьев Ю.Н.

ИХБФМ СО РАН, Новосибирск

ynvorob@niboch.nsc.ru

Биологические макромолекулы функционируют в клетке при различных значениях концентрации протонов, т.е. величинах pH. Стабильность структуры и функциональная активность молекул белков коррелирована с величиной pH водного раствора, которая определяет степень ионизации боковых и концевых групп [1]. Рассмотрена реализация нового метода молекулярной динамики при постоянном значении pH в потенциале средних сил водного протонного резервуара в условиях равновесного титрования (МД-pH-PT). Показано, что: 1) оптимальным, является выполнение моделирования для топологии белка в наивероятном, для данной конформации, ионизационном состоянии, с учетом поправочного ионизационного потенциала средних сил, учитывающего равновесный ансамбль ионизационных состояний; 2) новый метод МД-pH-PT позволяет выполнять оптимизацию структуры и полной свободной энергии молекулы белка в водном растворе при постоянном pH, а также рассчитывать pH-зависимые свойства. Метод МД-pH-PT обладает уникальными особенностями: 1) использует наиболее точную и вычислительно-эффективную реализацию расчета электростатической энергии молекулы белка в растворе, модель непрерывных диэлектрических сред с уравнением Пуассона [2] и обобщенный борновский метод с «идеальными» борновскими радиусами атомов; 2) использует единую модель поверхности потенциальной энергии в ионизационно-конформационном фазовом пространстве, как для расчета потенциальной энергии молекулы белка и атомных сил, так и для определения ионизационных состояний; 3) вычисляет полную свободную энергию молекулы белка в водном растворе в протонном резервуаре в условиях равновесного титрования. Работоспособность нового метода МД-pH-PT продемонстрирована на примере молекулы белка ВРТИ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований № 09-04-00136, а также Министерства образования и науки РФ, программа поддержки ведущих научных школ НШ 3185.2010.4, Госконтракт № 02.740.11.0079, Сибирского отделения РАН, интеграционные проекты №26 и №119 2009-2011 гг.

1. Williams S.L., Oliveira C.A.F., McCammon J.A. 2010. Coupling constant pH molecular dynamics with accelerated molecular dynamics J Chem Theory Comput 6. 560-568. 2. Vorobjev Y.N., Vila J.A., Scheraga H.A. Fambe-pH: A Fast and accurate method to compute the total solvation free energies of protein. 2008. J Phys Chem. 112. 11122-11136

ФЕМТОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ НАНОБИОТЕХНОЛОГИЯ ОБЪЕКТ ОЦЕНКИ В ВИДЕ
«ЕДИНОЙ ТЕХНОЛОГИИ»

Петровский В.П.^{*1}, Петровская Е.В.²

¹ОИВТ РАН, Москва, ²МФТИ, Долгопрудный

*Petrovsky@mail.ru

Клеточные биотехнологии, основанные на использовании инновационной комбинированной системы - фемтосекундного оптического лазерного пинцета-скальпеля [1], являются ярким примером, когда фундаментальная наука становится основой технологических прорывов. Расширение контактов науки и промышленности, внедрение инновационных разработок в экономический оборот, с привлечением частного капитала, изменения в законодательстве, дающие права институтам РАН создавать малые внедренческие предприятия с учредительным взносом в виде нематериальных активов [2], непременно потребует стоимостной оценки результатов фундаментальных и прикладных исследований, полученных в учреждениях РАН, за счет государственного бюджета. В настоящей работе для целей стоимостной оценки инновационный объект - фемтосекундный лазерный пинцет-скальпель, рассматривается как «единая технология» - совокупный научно-технический результат синергетического взаимодействия идентифицируемых и неидентифицируемых нематериальных активов научного предприятия [3]. На основе метода анализа иерархий показано, что в общем случае определение стоимости единой технологии это трудно формализуемая, многофакторная математическая задача в условиях неопределённости. Стоимость зависит от большого числа факторов, - рыночных, правовых, экономических, научно-технических, и соответственно большого числа параметров, характеризующих факторы. Учитывая, невозможность аналитического учёта каждого отдельного параметра на стоимость единой технологии, для количественного учёта влияния основных, качественных параметров, вводятся интегральные количественные характеристики, в виде коэффициентов значимости единой технологии и бренд фактора. Эти интегральные коэффициенты определяются на основе генеральных определительных таблиц, разработанных на основе метода рейтинга/ранжирования с использованием подхода Ренсиса Лайкерта, в котором латентной переменной является уровень влияния параметра на стоимость единой технологии. Предложенный метод стоимостной оценки единых технологий учитывает стадию готовности к промышленному внедрению, совокупные затраты на создание, коммерческую значимость, а также бренда разработчика.

1. Ракитянский М.М., Агранат М.Б. Ашитков С.И., Карагяур М.Н., Мухамеджанова Д.М., Домогатский С.П., Овчинников А.В., Ситников Д.С., Стамбольский Д.В., Шевелев И.Н. "Исследования биологических объектов на клеточном и субклеточном уровне с помощью фемтосекундного лазерного оптического пинцета-скальпеля" Вестник трансплантологии и искусственных органов, 3 (2009)
2. Федеральный Закон Российской Федерации от 2 августа 2009 г. №217-ФЗ "О внесении изменений в отдельные законодательные акты РФ по вопросам создания бюджетными научными и образовательными учреждениями хозяйственных обществ в целях практического внедрения результатов интеллектуальной деятельности"
3. Петровский В.П., Петровская Е.В. «Стоимость прав на единую технологию как результат деятельности научных учреждений РАН» "Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах" тезисы докладов стр.33, 23 июля - 1 августа 2009 г., Новый Афон, Абхазия.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АДсорбЦИИ
ПРЕКУРСОРОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ И МЕДИ

Жукова И.Н.*¹, Игуменов И.К.¹, Головнев И.Ф.²

¹ИНХ СО РАН, ²ИТПМ СО РАН, Новосибирск

*zhukova@niic.nsc.ru

Настоящая работа посвящена разработке подходов и методологии исследования процессов адсорбции летучих соединений металлов с органическими лигандами на поверхностях.

Адсорбция из газовой фазы является первой стадией химических превращений соединений на поверхности (процессы химического осаждения покрытий из газовой фазы, гетерогенный катализ и др.) и определяет состав, структуру синтезируемых покрытий и соединений.

Для моделирования физических основ адсорбции сложных молекул на различных типах поверхности и возможности управления этим процессом необходимо решение ряда фундаментальных проблем: во-первых, описать взаимодействие отдельных молекул с исходной подложкой. При этом необходимо провести исследование влияния как типа, так и структуры подложки, ее температуры на процессы образования адсорбатов; во-вторых, необходимо промоделировать рассеяние ансамбля молекул с заданными статистическими параметрами на подложке.

Для теоретического моделирования, сложность задачи нарастает непропорционально быстро с ростом числа атомов в молекуле. Поэтому, описание многоатомных молекул является трудоёмким процессом. Кроме того, большинство программных пакетов не позволяют рассчитывать динамику движения атомов в молекуле. В их возможности входит только оптимизация геометрии молекулы.

В рамках метода молекулярной динамики предложен подход к описанию процессов адсорбции на структурированной поверхности молекул прекурсоров с реальной молекулярной геометрией. В качестве модельного прекурсора был выбран бис гексафторацетилацетонат палладия, а в качестве подложки – поверхность кремния и меди.

Для описания взаимодействия атомов в молекуле использовался модифицированный многочастичный потенциал, позволяющий описывать энергоперенос между различными колебательными модами и степенями свободы молекулы. Учтены парные взаимодействия (по длинам связи), трехчастичные (угол между связями) и четырехчастичные взаимодействия (угол между связью и плоскостью, образованной парой других связей).

Для моделирования процессов адсорбции кремниевая и медная подложки брались в форме прямоугольного параллелепипеда с фиксированным числом кристаллических ячеек вдоль соответствующих осей лабораторной системы координат. Взаимодействие атомов кремния описывалось с помощью потенциала Стиллинджера-Вебера, а взаимодействие атомов меди описывалось с помощью потенциала Воутера.

Взаимодействие молекулы с подложкой учитывалось в парном атом-атомном приближении. Для описания такого взаимодействия использовался модифицированный потенциал Букингема.

Это позволило детализировано изучить явление осаждения молекулы на подложку, учесть энергоперенос между степенями свободы молекулы и подложки и провести исследования влияния начальных параметров молекулы и подложки на процесс адсорбции.

**ВЛИЯНИЕ НАНОДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ГЕТЕРОГЕННОГО МАТЕРИАЛА**

*Фомин В.М.¹, Борисова Т.А.¹, Филиппов А.А.*¹, Брусенцев А.Г.²*

¹ИТПМ СО РАН, Новосибирск, ²ИТПМ, новосибирск

*tata.nsk@mail.ru

Одной из актуальных проблем современного машиностроения является повышения эффективности и работоспособности материалов.

Как известно, материал состоит из различных компонентов, обладающих определенными свойствами. Эти компоненты связаны между собой. Эффективность и работоспособность материала зависят от правильного выбора исходных компонентов и технологии их совмещения.

Настоящей целью работы является по известным механическим характеристикам компонент определить механические характеристики смеси. Работа состояла из теоретической и экспериментальной части.

В экспериментальной части работы были подготовлены образцы из эпоксидной смолы с добавлением нанопорошка, которые заливались в специальные формы, изготовленные из пентеласта. Образцы изготавливались как из эпоксидной смолы с отвердителем, так и с добавлением различной концентрации нанопорошка SiO_2 . Затем проводились эксперименты на растяжение на испытательной машине Zwick Roell Allround. В результате были получены диаграммы нагрузки от удлинения, а также напряжения образца от деформации в зависимости от массовых концентраций компонент.

Получены численные значения максимальных напряжений и модулей упругости (Юнга). При увеличении массовой концентрации нанопорошка в целом наблюдалось снижение предела прочности образцов, а также уменьшение величины относительной деформации. При этом было выявлено увеличение модуля упругости образцов на 37% при концентрации до 1% ($=19,85$ мПа Е= $13,3$ гПа). При дальнейшем увеличении концентрации модуль упругости уменьшался.

В теоретической части работы была предложена математическая модель гетерогенного материала. Используя теорию многофазных сред, предложенную Х.А.Рахматулиным и гипотезу о том, что перемещения сред совпадают, была предложена зависимость модуля упругости от объемных концентраций компонентов смеси. Представлена связь массовой и объёмной концентраций. Кратко описаны другие математические модели гетерогенных смесей.

Проведено сравнение между теоретическими и экспериментальными результатами. В исследуемом интервале было получено качественное совпадение.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗБИРАТЕЛЬНО ПРОНИЦАЕМЫХ МИКРООБЪЕКТОВ ПО
ОТНОШЕНИЮ К ГЕЛИЮ**

Верещачин А.С., Зиновьев В.Н., Пак А.Ю., Фомина А.Ф., Казанин И.В., Лебига В.А.,
Фомин В.М.*

ИТПМ СО РАН, Новосибирск

*vereshchag@itam.nsc.ru

Проблемы создания объектов, избирательно проницаемых по отношению к легким газам, являются актуальными на сегодняшний день, относясь по своей сути к такой популярной тематике, как течение жидкости или газа в наноканалах. В данном случае нано-эффекты представляют огромный интерес, как явления позволяющие сортировать молекулы по роду и размеру и, таким образом, например, производить разделение газовых смесей. В качестве примера можно рассмотреть течение в стенке полый стеклянной микросферы (ценосферы). Одна из гипотез о структуре стенки ценосферы, что она представляет собой образование переплетений из наноканалов, через которые проходят такие легкие газы, как водород или гелий. Это свойство стенки ценосферы позволяет использовать их в качестве своеобразных микробаллонов для удерживания легких газов, и, в дальнейшем, применять в установках по обогащению гелий содержащей смеси гелием.

Проведение экспериментального исследования динамики процессов сорбции и десорбции гелия микросферами проходило на специальном спроектированном экспериментальный стенде. В качестве вещества для поглощения гелия в работе использовались полые стеклянные микросферы типа МСВ-1Л. В первом случае, емкость, заполненная микросферами, сначала вакуумировалась, а затем в нее напускался газ (гелий, воздух или их смесь) до некоторого рабочего давления. После напуска газа вся запорная арматура перекрывалась и далее в течение некоторого промежутка времени в емкости измерялось давление. Во втором случае, из емкости, непосредственно после прекращения процесса сорбции, удалялся весь остаточный газ путем сброса давления до атмосферного и ее последующего вакуумирования с помощью вакуумного насоса.

Математическая модель задачи поглощения гелия микросферами выводилась из предположения степенного закона проницаемости газа сквозь стенки микросфер, который в частном случае является следствием, например таких явлений, как мгновенная диффузия или фильтрация гелия сквозь стенку частицы [1-3].

Проведенные исследования динамики процессов сорбции и десорбции гелия полыми стеклянными микросферами продемонстрировали, что микросферы являются проницаемыми для гелия и не проницаемы для воздуха. Показано, что скорость протекания процесса сорбции гелия, в основном, определяется величиной перепада парциальных давлений гелия внутри и вне микросфер, при постоянстве других параметров (температуры, размера микросфер и т.д.). Показана автомодельность экспериментальных кривых сорбции. Рассмотрен степенной закон фильтрации гелия сквозь стенки микросфер показал наилучшее совпадение с результатом эксперимента в случае показателя степени $n > 1$ и качественное совпадение при показателе степени равным 1. Анализ процессов десорбции гелия из микросфер не позволил установить математические законы и требует дальнейшего исследования.

- Сулейманов Б.А. Особенности фильтрации гетерогенных систем. – М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006. – 356 с.
- Верещагин А.С., Верещагин С.Н., Фомин В.М. Математическое моделирование движения импульса концентрации гелия по колонке, заполненной микросферами// ПМТФ. 2007. Т. 48, 3. С. 92–102.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА ОСАЖДЕНИЕ ВЕЩЕСТВ В НАНОПОРАХ

Головнев И.Ф.*¹, Александрова Н.К.¹, Игуменов И.К.², Кучумов Б.М.², Фомин В.М.¹

¹ИТПМ СО РАН, ²ИНХ СО РАН, Новосибирск

*golovnev@itam.nsc.ru

В работе проведено численное исследование влияния газодинамических процессов на осаждение молекул прекурсора на поверхность субмикронных каналов цилиндрической формы. Для этого использовалось сочетание метода Монте – Карло и метода молекулярной динамики.

Рассматривались случаи затекания газа из объема реактора в канал (через одно и два сечения) и в нанопору. Предполагалось, что газ в реакторе находится в равновесном термодинамическом состоянии, т.е. распределение молекул по скоростям описывается распределением Максвелла. Давление и температура газа в реакторе, а также радиус канала и его длина в расчетах были внешними контролируемыми параметрами, определяющими поток молекул из объема в канал. Начальное положение и скорости молекул, в объеме перед входным сечением канала, находились с помощью метода Монте-Карло. Далее движение молекул описывалось с помощью метода молекулярной динамики.

Молекулы моделировались твердыми сферами с заданным газокинетическим диаметром. Взаимодействие между молекулами описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, а между молекулами и стенкой – отталкивательной ветвью потенциала Леннарда-Джонса. Эта постановка задачи позволило исследовать влияние давления и температуры газа в реакторе, радиуса канала и его длины, а также радиуса молекул на газодинамические процессы в каналах без теплообмена со стенками. Эти результаты являются тестовыми для анализа влияния процессов адсорбции и энергообмена молекул со стенками канала, которые были учтены на следующем этапе.

Энергообмен молекул со стенками моделировался следующим образом. Если молекула взаимодействовала со стенкой, то разыгрывалась вероятность ее адсорбции на поверхность и время жизни на поверхности с помощью метода Монте-Карло. При этом положение молекулы фиксировалось на поверхности (не учитывалось латеральное движение на поверхности), но учитывалось взаимодействие с другими молекулами в канале. Далее с помощью метода Монте – Карло по закону «косинуса» с температурой стенки, находилась начальная скорость молекулы и рассчитывалось ее дальнейшее движение в канале с помощью метода молекулярной динамики.

Эта модель позволила изучить влияние температуры стенок канала на газодинамические процессы внутри канала. На последнем этапе находилось распределение концентрации молекул, температуры и средней скорости движения молекул вдоль оси канала.

В результате проведенных расчетов, изучено влияние внешних параметров (температура газа, поверхности и т.д.) на распределение потоков вдоль оси канала. Показано, что численные результаты качественно совпадают с экспериментальными данными.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Головнева Е.И.* , Головнев И.Ф., Фомин В.М.

ИТПМ СО РАН, Новосибирск

*elena@itam.nsc.ru

На особую роль свободных поверхностей и границ раздела сред в процессах деформации и разрушения материалов указывают экспериментальные и теоретические работы коллектива академика В.Е. Панина [1 – 3]. Это обусловило необходимость проведения молекулярно-динамических исследований явлений на границах раздела материалов. На первом этапе цикла работ, посвященных исследованию влияния границы раздела, проведен численный расчет одноосного растяжения гетероструктуры CuAg для криогенных температур.

Начальные данные готовились следующим образом. Строился идеальный кристалл меди в форме прямоугольного параллелепипеда с числом кристаллических ячеек $n_x = 14$, $n_y = n_z = 4$ вдоль соответствующих осей и такой же кристалл серебра с размерами $n_x = 13$, $n_y = n_z = 4$. Далее кристалл серебра размещался на расстоянии $a_{Cu}/2$ от грани медного кристалла по оси Z .

Далее вся структура охлаждалась с помощью метода искусственной вязкости и находилось положение атомов в глобальном минимуме потенциальной энергии. Шаг по времени при этом составляет 10-16 с. Полученные таким способом координаты и импульсы атомов использовались далее в качестве начальных данных для расчета одноосной деформации вдоль оси X .

Граничные условия моделировались так: атомы граней, перпендикулярных оси X помещались в гармонический потенциал. На левой грани скорость v_0 полагалась равной нулю, а на правой грани – 10 м/с. Это позволило моделировать неподвижный и движущийся зажим с помощью обобщенного потенциала.

Для анализа процесса одноосного растяжения гетероструктуры рассчитывались такие макрохарактеристики системы, как силы, действующие со стороны зажима на медную и серебряную подсистемы со стороны движущегося зажима, полное относительное удлинение и изменение потенциальной энергии подсистем.

Найден интервал упругой деформации гетероструктуры: до значения относительного удлинения $\varepsilon_c = 0.074$. Анализ типа деформации для $\varepsilon \geq \varepsilon_c$ проведен по признаку обратимости геометрической формы структуры после снятия внешней нагрузки. Показано, что при $\varepsilon > \varepsilon_c$ имеют место пластические изменения.

То же самое дает и энергетический анализ гетероструктуры. В области упругой деформации потенциальная энергия кристалла равна первоначальной, а в области пластических изменений значительно превосходит первоначальное значение.

Анализ внешней формы гетероструктуры после охлаждения также подтверждает наличие пластических деформаций при $\varepsilon > \varepsilon_c$.

Для выявления роли границы раздела в гетероструктуре проведен сравнительный анализ: расчет одноосного растяжения кристалла меди, представляющего точную копию медной части гетероструктуры. Граничные условия полностью совпадали со случаем гетероструктуры.

Таким образом, наличие интерфейса кардинальным образом меняет не только механические характеристики отдельных частей гетероструктуры, но и характер процессов, протекающих в ней при внешнем механическом воздействии.

1. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Панин А.В. // Физическая мезомеханика. – 2006. – Т.9. - №3.- с.9-22.
2. Панин В.Е., Панин А.В., Моисеенко Д.Д., Шляпин А.Д., Аврамов Ю.С., Кошкин В.И. // Физическая мезомеханика. – 2006. – Т.9. - №4.- с.5-13.
3. Панин В.Е., Моисеенко Д.Д., Максимов П.В., Панин А.В. // Физическая мезомеханика. – 2006. – Т.9. - №5.- с.5-16.

ВЛИЯНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ НА ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА В МАТЕРИАЛАХ С МИКРОКАПИЛЛЯРНОЙ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ

Жилин А.А. , Федоров А.В.*

ИТПМ СО РАН, Новосибирск

**lab20@itam.nsc.ru*

В первой части работы проводится экспериментальное исследование процессов капиллярного увлажнения и сушки зерен силикагеля. Рассмотрено два способа увлажнения материала с развитой поверхностной и внутренней микрокапиллярной пористой структурой: пропитка и сорбция. Проведено сравнение этих способов. Выполнен анализ влияния скорости увлажнения и ее продолжительности на прочность зерен силикагеля. Экстрагирование влаги из увлажненных образцов осуществлялось тремя способами: микроволновым, конвективным и акусто-конвективным. Показано влияние перечисленных выше методов сушки на скорость и качество осушаемого материала, в частности преимущество акусто-конвективного способа сушки перед остальными. Исследовано влияние начальной влажности зернистого силикагеля и частоты акустических колебаний на кинетику экстракции влаги.

Во второй части работы приводится математическая модель для описания изучаемых явлений, основанная на двумерном уравнении диффузии записанном в цилиндрической системе координат. Уравнение дополнялось соответствующими начальными и граничными условиями. Решение находилось численно, для этого использовался вариант метода прямых. Полученное распределение изолиний влажности вдоль цилиндрического образца с зернами силикагеля для различных значений начальной влажности показало, что основной вклад в процесс сушки оказывает выделение влаги с боковой поверхности образца. Проведенное сравнение полученных расчетных данных с результатами экспериментов по зависимости изменения влажности в процессе акусто-конвективной сушки показало удовлетворительное совпадение. Для проведения расчетов был определен коэффициент диффузии для засыпки зернистого силикагеля с развитой поверхностной и внутренней микрокапиллярной пористой структурой, который оказался близок к известным в литературе.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 10-08-00239).

МОЛЕКУЛЯРНО ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ НИНОСТРУКТУР ПРИ ОСАЖДЕНИИ ПАРОВ МЕТАЛЛА ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ

Игошкин А.М., Головнев И.Ф. , Фомин В.М.*

ИТПМ СО РАН, Новосибирск

**golovnev@itam.nsc.ru*

В настоящее время, в микроэлектронике ведущее положение при формировании наноструктур заданной конфигурации играет молекулярно-пучковая технология. Что обуславливает многочисленные как теоретические, так и экспериментальные работы в этом направлении. В то же время бурно развивается технологии ALD и CVD реакторов, в которых производится осаждение из газовой фазы, востребованное в ряде технических приложений. В частности, для получения микрокатализаторов необходимо нанести покрытие на поверхности нанопор, имеющих сложную конфигурацию. Это можно сделать лишь только используя осаждение из газовой фазы. Среди теоретических методов исследования самоорганизации паров металла на поверхности самым фундаментальным после прямых квантовых расчетов является метод молекулярной динамики. В то же время молекулярно динамические исследования данного направления практически отсутствуют. Что в свою очередь определило актуальность наших исследований.

В данной работе рассматривается формирование нанослоя на поверхности медной подложки путем моделирования осаждения меди из газообразной фазы. Моделирование данного процесса производилось методом молекулярной динамики, для которого в первую очередь необходим выбор подходящего потенциала взаимодействия. В нашем случае межатомные взаимодействия описывались многочастичным потенциалом Воутера, полученным в рамках метода внедренного атома (Embedded atom method). Потенциал Воутера учитывает взаимодействие атомов до третьего ближайшего соседа включительно. Моделирование осаждения меди из газообразной фазы производилось методом прямого статистического моделирования с использованием выражений из кинетической теории газов. При этом предполагалось, что координаты молекулы описываются равномерным распределением, а скорости в пучке - максвелловским. Температура медной подложки поддерживалась на постоянном уровне путем введения диссипативного члена в уравнения движения атомов подложки. Численный расчет траекторий производился с помощью пропагаторной модификации метода молекулярной динамики. Была реализована схема второго порядка точности с использованием «списков Верлета».

Начальное состояние подложек готовилось в несколько этапов. Первоначально производилось построение идеального кристалла конечных размеров с параметрами из макросреды. Дефекты на поверхности подложки вводились путем удаления некоторого количества атомов у идеального кристалла меди. Затем было произведено его

охлаждение методом искусственной вязкости для нахождения состояния глобального минимума энергии системы. Для приготовления начального состояния с ненулевой температурой подложка нагревалась методом стохастических сил.

На приготовленные подложки производилось осаждение ансамбля частиц из газовой фазы. На структуру формирующихся на поверхности подложки нанослоев влияет ряд параметров осаждения, таких как тип и размер дефектов подложки, температура подложки и газовой фазы. Для того чтобы исследовать влияние вышеперечисленных параметров производился детальный анализ полученных структур. В результате было показано то, как различные параметры осаждения влияют на образование дефектов в сформированном слое.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ГАЗОДИНАМИЧЕСКОГО ПОТОКА ГЕЛИЯ В НАНОКАНАЛАХ

Ожгибесов Д.С., Головнев И.Ф., Фомин В.М.*

ИТПМ СО РАН, Новосибирск

**golovnev@itam.nsc.ru*

В данной работе проведено молекулярно-динамический расчет движения газодинамического потока гелия в наноканалах цилиндрической формы. В наноканал цилиндрической формы с заданными радиусом и длиной с помощью метода прямого статистического моделирования вбрасывались атомы гелия из емкости с заданными параметрами газа. В работе исследовалось как истечение газа в вакуум, так и возможность встречного потока. Температура газа во всех расчетах предполагалась равной 300 К. Исследования проводились в интервалах параметров: давление - от 0.1 до 5 атмосфер, длина каналов - от 100 А до 10 мкм, радиусы канала - от 20 до 500 А. (Особое внимание уделено каналам с радиусом 110 А, т.к. это размеры каналов в мембранах, выпускаемых промышленностью в настоящее время). На основе прямого сравнения результатов, полученных в рамках метода молекулярной динамики и уравнения Больцмана, было показано, что в интервале размеров каналов, представляющих интерес для нанотехнологий, необходимо применять метод молекулярной динамики. При моделировании взаимодействия атомов гелия между собой использовался потенциал Леннарда-Джонсона с параметрами, найденными в эксперименте. На первом этапе расчеты проведены для модели абсолютно упругих стенок канала, т.е. энергообмен между газом и стенками канала отсутствовал. По этой причине взаимодействие атомов гелия со стенкой описывалось отталкивательной ветвью потенциала Леннарда-Джонсона. Данный случай является тестовым в иерархии физических моделей. В случае учета теплообмена использовалась комбинированная модель метода молекулярной динамики и статистического моделирования. Траектории атомов рассчитываются в рамках классической механики, а отражение от стенок моделируется с помощью метода Монте-Карло для распределения Максвелла с температурой стенок. Благодаря такому моделированию начальных данных температура и давление газа в емкости полностью определяют газодинамический поток в канале. После такого задания начальных данных решается система дифференциальных уравнений движения для всех атомов гелия, взаимодействующих между собой и со стенками канала, т.е. рассчитываются траектории атомов. После вылета атома за пределы некоторого фиксированного объема за сечениями канала, считается, что атом покинул канал. Число атомов, покинувших канал через первое или второе сечение в единицу времени, определяет прямой и обратный потоки. В результате исследования исследован релаксационный период нарастания потоков и выход на стационарное состояние. Оно определяется очевидным соотношением равенства входящего и выходящих потоков. После этого численный расчет процесса затекания атомов гелия в канал прерывался. Показано, что поток, вытекающий из резервуара с большим давлением пропорционален разности давлений, а тангенс угла наклона нелинейно зависит от длины канала и от большего давления во входном сечении. Кроме того, для определенного интервала геометрических размеров канала и давлений на входных сечениях обнаружен так называемый эффект запирания. В этом случае вытекающие потоки из обоих сечений одинаковы и даются простым выражением, основанном на результатах молекулярно-кинетической теории.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУР

Фомин В.М., Головнев И.Ф.*

ИТПМ СО РАН, Новосибирск

**fomin@itam.nsc.ru*

Актуальность исследования термодинамических свойств наноструктур обусловлена как необходимостью решения фундаментальной проблемы создания теоретических методов расчета характеристик систем с большим, но конечным числом атомов (в отличие от статистической физики и термодинамики), так и их использованием для создания новых наноматериалов с заранее заданными свойствами и соответствующими технологическими методами их формирования. Необходимо отметить ряд особенностей, возникающих при исследовании динамических явлений в наноструктурах. Во-первых, это масштабы в пространстве: характерные размеры наноструктур изменяются в пределах от 10 до 1000 А. Во-вторых, определяющие процессы имеют длительность от долей периода молекулярных колебаний и колебаний атомов в кристаллических структурах, что составляет порядка 10^{-14} с, до времени прохождения волны возмущения по характерному масштабу в пространстве, т.е. до 10^{-9} с. Такие пространственно-временные масштабы динамических явлений обуславливают сложность проведения их экспериментального исследования, по крайней мере, в настоящее время. Все это обусловило необходимость использования метода молекулярной динамики для исследования термодинамических процессов и расчета соответствующих характеристик, а также явлений на микроуровне, в которых можно пренебречь квантовыми эффектами. В настоящей работе впервые предложен способ расчета термодинамических потенциалов наноструктур с помощью метода молекулярной динамики, основанного на первых принципах. Используя известный факт, что термическое и калорическое уравнения состояния распадаются на сумму холодных и тепловых составляющих, была рассчитана нулевая изотерма для конкретной системы – медного кластера. Для этого использовался метод искусственной вязкости, позволивший моделировать изотермический процесс адиабатического нагружения кластера внешним фиксированным давлением при нулевой температуре. Далее вся система изохорически разогревалась с помощью метода стохастических

сил при условии поддержания равновесного термодинамического состояния. Моделирование постоянного объема производилось внешней гармонической силой действующей на атомы поверхности при условии превышения фиксированного расстояния, соответствующего заданному начальному холодному давлению, от центра кластера. При этом рассчитывалась зависимость тепловых составляющих давления и внутренней энергии от температуры. Это позволило рассчитать термическое и калорическое уравнения состояния нанобъектов в интервале параметров, позволяющих использовать метод молекулярной динамики. При этом внутренняя энергия рассчитывалась в «чужих» переменных V , T . Далее, используя уравнение Гиббса – Гельмгольца и найденные уравнения состояния, определялась свободная энергия наноструктуры, для которой эти переменные уже являются собственными. Это позволило определить полностью термодинамику исследуемой системы. Основываясь на явлении скэйлинга, показана возможность применения данного метода к расчету термодинамических свойств макроструктур, необходимых в механике сплошных сред.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НАНОКАПЕЛЬ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Харламов Г.В.

НГТУ, Новосибирск

g_kharlamov@ngs.ru

Одним из эффективных методов получения наночастиц является метод их конденсации в пересыщенном паре. Первым этапом конденсации является нуклеация – процесс образования критического зародыша. Такой критический зародыш представляет собой минимальный кластер, который затем вырастает до нанокapли за счет присоединения молекул пара и, в результате охлаждения, превращается в наночастицу. В классической теории нуклеации работа образования критического зародыша связывается с его поверхностным натяжением. Эта работа составляет потенциальный барьер, который должна преодолеть система, чтобы образовался критический зародыш. Высотой этого барьера определяется скорость нуклеации. В связи с этим представляется очень важным уметь рассчитывать термодинамические свойства малых кластеров или нанокapель. Особый интерес представляет поверхностное натяжение нанокapель.

Ранее нами были проведены расчеты поверхностного натяжения нанокapель методом молекулярной динамики [1, 2]. Было показано, что поверхностное натяжение малых капель сильно уменьшается с уменьшением радиуса капли и становится равным нулю при некотором ненулевом эквимолярном радиусе R_0 . Величина R_0 сильно зависит от температуры и стремится к бесконечности в критической точке жидкость – пар. Для капель меньшего размера понятие поверхностного натяжения неприменимо, а сама капля находится в метастабильном состоянии. Возникает вопрос о применимости понятия поверхностного натяжения к критическим зародышам, возникающим в процессе нуклеации.

Для ответа на этот вопрос были проведены расчеты возникновения и роста нанокapель методом неравновесной молекулярной динамики. Было показано, что при определенных условиях критический зародыш является кластером, размеры которого меньше R_0 нанокapли при этих условиях проведения процесса. Это требует пересмотра основных положений классической теории нуклеации.

1. Харламов Г.В., Онищук А.А., Пуртов П.А., Восель С.В., Болеста А.В. // Оптика атмосферы и океана. 2008. Т. 21. № 9. С.784-788.
2. G.V. Kharlamov, A.A. Onischuk, P.A. Purtov, S.V. Vosel, A.V. Bolesta // e-Journal of Surface Science and Nanotechnology. 2010. V.8. P.197-202.

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

ГНЦ РФ ИТЭФ — Государственный научный центр РФ Институт теоретической и экспериментальной физики
ИГиЛ СО РАН — Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН
ИНХ СО РАН — Институт неорганической химии Сибирского отделения РАН
ИОФ РАН — Институт общей физики РАН
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
ИТПМ СО РАН — Институт теоретической и прикладной механики. им. С.А. Христиановича Сибирского отделения РАН
ИХБФМ СО РАН — Институт химической биологии и фундаментальной медицины Сибирского отделения РАН
ИХТТМ СО РАН — Институт химии твердого тела механохимии Сибирского отделения РАН
КБГУ — Кабардино-Балкарский государственный университет
МГУ — Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
МИФИ — Московский государственный инженерно-физический институт (технический университет)
МФТИ — Московский физико-технический институт (государственный университет)
НГТУ — Новосибирский государственный технический университет
НИИ ПМА КБНЦ РАН — Научно-исследовательский институт прикладной математики и автоматизации Кабардино-Балкарского научного центра РАН
НИИЯФ МГУ — Научно-исследовательский институт ядерной физики Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова
ОИВТ РАН — Объединенный институт высоких температур РАН
РФЯЦ-ВНИИТФ — Российский Федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. ак. Е.И. Забабахина
СПбГУ — Санкт-Петербургский государственный университет
ФИАН — Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
ЮНПУ — Южноукраинский национальный педагогический университет имени К. Д. Ушинского
ЮУрГУ — Южно-уральский государственный университет

ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. *Борисова Татьяна Александровна*, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирская обл., Новосибирск, Институтская 4/1, тел.: 89231223552, факс: 83833300655, tata.nsk@mail.ru
2. *Верещагин Антон Сергеевич*, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирская область, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1, тел.: +7(383)3303804, факс: +7(383)3307268, vereshchag@itam.nsc.ru
3. *Воробьев Юрий Николаевич*, ИХБФМ СО РАН, 630090, Новосибирск, Просп. Ак.Лаврентьева, д.8, тел.: +7(383)3635174, факс: +7(383)-36-35-153, ynvorob@niboch.nsc.ru
4. *Гавашели Давид Шотаевич*, НИИ ПМА КБНЦ РАН, 360000, Кабардино-Балкарская республика, Нальчик, ул. Шортаново 89а, тел.: 89287085367, факс: 89287085367, yu-pakhunova@mail.ru
5. *Гавашели Юлия Олеговна*, КБГУ, 360000, Кабардино-Балкарская республика, Нальчик, ул. Чернышевского, 173, тел.: 89287168367, факс: 89287168367, yu-pakhunova@mail.ru
6. *Гаркушин Геннадий Валерьевич*, ИПХФ РАН, 142432, Московская область, Черноголовка, Семенова 1, тел.: +7(496)52-49472, факс: +7(496)52-49472, garkushin@icp.ac.ru
7. *Головнев Игорь Федорович*, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д.4/1, тел.: +7(383)3303804, факс: +7(383)3307268, golovnev@itam.nsc.ru
8. *Головнева Елена Игоревна*, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д.4/1, тел.: +7(383)3303804, факс: +7(383)3307268, elena@itam.nsc.ru
9. *Горохова Ирина Васильевна*, ЮНПУ, 65020, Украина, Одесса, Старопортофранковская, 26, тел.: (048)7872497, факс: (048)7325107, i.gorochova@rambler.ru
10. *Груздков Алексей Андреевич*, СПбГУ, 191119, Санкт-Петербург, ул. Боровая, д.24, кв.9, тел.: +7(812)7122417, факс: +7(812)3214771, gruzdkov@mail.ru
11. *Губин Сергей Александрович*, МФТИ, 117218, Москва, ул. Профсоюзная, л. 7/12, кв. 83, тел.: +7(916)9546110, факс: +7(495)2373025, gubin_sa@mail.ru
12. *Жилин Александр Анатольевич*, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д.4, стр.1, тел.: +7(383)3308538, факс: +7(383)3307268, lab20@itam.nsc.ru
13. *Жукова Ирина Николаевна*, ИНХ СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д.3, тел.: +7(383)3309556, факс: +7(383)3309489, zhukova@niic.nsc.ru
14. *Зиборов Вадим Серафимович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, тел.: +7(495)4942610, факс: +7(495)4857990, shumova@ihed.ras.ru
15. *Иванов Константин Анатольевич*, МГУ, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 62, тел.: +7(495)9395318, факс: +7(495)939-3113, iv_konst_an@rambler.ru
16. *Игошкин Антон Михайлович*, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д.4/1, тел.: +7(383)3303804, факс: +7(383)3307268, golovnev@itam.nsc.ru
17. *Князев Никита Сергеевич*, ОИВТ РАН, 141707, г. Москва, Москва, ул. Керченская,1,к.1413, тел.: +7(916)3489943, факс: +7(495)4857990, knyazev.n@gmail.com
18. *Колесников Сергей Александрович*, ИПХФ РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка, пр-т Акад. Семёнова, д. 1, тел.: +7(49652)24125, факс: +7(49652)49472, ksa@icp.ac.ru
19. *Краснова Полина Андреевна*, ОИВТ РАН, 123070, Москва, Волоколамское ш., д. 1 / 108, тел.: +7 (926) 791 44 25, факс: +7(495) 485 79 90, polikarp@ihed.ras.ru
20. *Красюк Игорь Корнелиевич*, ИОФ РАН, 119991, Москва, ул. Вавилова, д. 38, тел.: 8(499)5038130, факс: 8(499)1352055, krasyuk99@rambler.ru
21. *Мальцев Илья Владимирович*, ЮУрГУ, 454138, Челябинск, Комсомольский пр-т, д. 42, тел.: +7(922)7100472, факс: +7(351)2679023, maltsev.ilya@gmail.com
22. *Норман Генри Эдгарович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: Факс Пример: +7(495)4857990, norman@ihed.ras.ru
23. *Ожгибесов Дмитрий Сергеевич*, ИТПМ СО РАН, 630005, Новосибирская обл., Новосибирск, ул. Гоголя, д.25, тел.: +7(383)2248748, факс: +7(383)3307268, dozhgibesov@mail.ru
24. *Орешкин Владимир Иванович*, ИСЭ СО РАН, 634055, Томская обл., Томск, пр. Академический 2/1, тел.: +7(3822)492988, факс: +7(3822)491677, oreshkin@ovpe.hcei.tsc.ru
25. *Орешкин Евгений Владимирович*, ФИАН, 119333, Московская обл., Москва, ул. Дмитрия Ульянова д. 5, тел.: +7(965)4035593, факс: +7(499)1326807, oreshkinev@scalpnet.ru
26. *Первов Дмитрий Васильевич*, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 18, 306, тел.: 89231282264, факс: 83833325055, pdv.nsk@gmail.com
27. *Петровская Елена Владимировна*, МФТИ, 125412, Москва, Москва, Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4859155, факс: +7(495)4857990, b1p2a3@mail.ru
28. *Петровский Виктор Павлович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, Ижорская, д.13,стр.2, тел.: +7(495)4859155, факс: +7(495)4857990, b1p2a3@mail.ru
29. *Поляков Дмитрий Николаевич*, ОИВТ РАН, 125412, -, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4841810, факс: +7(495)4857990, cryolab@ihed.ras.ru
30. *Прууэл Эдуард Рейнович*, ИГиЛ СО РАН, 630090, Новосибирск, ул. Терешковой, 6, кв. 142, тел.: +7(383)333-32-49, факс: +7(383)333-16-12, pruu@hydro.nsc.ru
31. *Пугачёв Леонид Петрович*, ОИВТ РАН, 141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Московское шоссе, д. 25, тел.: 89670797203, факс: 1, pugachev@ihed.ras.ru
32. *Савватимский Александр Иванович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)2294241, факс: +7(495)4857990, komitet@iht.mpei.ac.ru
33. *Савинцев Алексей Петрович*, КБГУ, 360004, Нальчик, ул. Чернышевского, д. 173, тел.: +7(8662)423777, факс: +7(8662)422560, png@kbsu.ru
34. *Сайтов Ильнур Миннигазыевич*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, saitov_06@mail.ru
35. *Сергеев Олег Вячеславович*, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, seoman@yandex.ru
36. *Синько Геннадий Васильевич*, РФЯЦ-ВНИИТФ, 456776, Челябинская обл., Снежинск, ул. Забавхина 32, кв.18, тел.: +7 (922)6335008, факс: +7(351)4632761, gevas@uniterra.ru

37. Скобелев Игорь Юрьевич, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, skobelev@izmaylovo.ru
38. Смирнов Александр Ильич, ИПФ РАН, 603950, Нижний Новгород, ул. Ульянова, д. 46, ИПФ РАН, тел.: +7(831)4160656, факс: +7(831)4160616, smirnov@appl.sci-nnov.ru
39. Смирнов Григорий Сергеевич, ОИВТ РАН, 141701, Московская обл., Москва, Пример: ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, grs90@mail.ru
40. Стегайлов Владимир Владимирович, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, stegailov@gmail.com
41. Тен Константин Алексеевич, ИГиЛ СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева, 15, тел.: +7 913 903 1515, факс: +7(383)333 1612, ten@hydro.nsc.ru
42. Тимофеев Алексей Владимирович, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, timofeevalvl@gmail.com
43. Федоров Александр Владимирович, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирск, Ул. Золотодолинская 35 кв. 23, тел.: +7(383)3308538, факс: +7(383)3307268, fedorov@itam.nsc.ru
44. Фокин Владимир Борисович, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел.: +7(495)4858545, факс: +7(495)4857990, Vladimir.Fokin@phystech.edu
45. Фомин Василий Михайлович, ИТПМ СО РАН, 630090, Новосибирск, ул.Институтская, д.4/1, тел.: +7(383)3308534, факс: +7(383)3300655, fomin@itam.nsc.ru
46. Харламов Георгий Владимирович, НГТУ, 630123, Новосибирск, ул. Аэропорт, д. 56, кв.85, тел.: +7(383)2002278, факс: +7(383) 3460209, g_kharlamov@ngs.ru
47. 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
48. Шумова Валерия Валерьевна, ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, тел.: +7(495)4942610, факс: +7(495)4857990, shumova@ihed.ras.ru