Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ОИВТ РАН)

УДК 538.91 + 539.893 + 536.752 + 533.9 + 550.36
Рег. № НИОКР АААА-А19-119061490106-6
Рег. № ИКРБС

УТВЕРЖДАЮ
Директор ОИВТ РАН,
академик РАН

_____ О.Ф. Петров
«_____» _____ 2019 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МУЛЬТИФАЗНЫХ И СТРУКТУРИРОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЙ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ СОСТОЯНИЙ, ВКЛЮЧАЯ ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ, ПРИСУЩИЕ ВНЕШНЕМУ ЯДРУ ЗЕМЛИ

(промежуточный за 2019)

Руководитель НИР
доктор физ.-мат. наук _____ А.А. Аливердиев

Москва 2019

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель проекта, главный научный сотрудник, доктор физ.-мат. наук	_____ подпись, дата	А.А.Аливердиев (введение, заключение, разделы 1-3 общее редактирование)
Главный научный сотрудник доктор физ.-мат. наук	_____ подпись, дата	М.Н. Магомедов (раздел 4, введение, заключение)
Старший научный сотрудник, кандидат физ.-мат. наук	_____ подпись, дата	В.Д. Бейбалаев (разделы 1,2)
Старший научный сотрудник	_____ подпись, дата	Р.А. Магомедов (раздел 1)
Младший научный сотрудник	_____ подпись, дата	Э.Н. Ахмедов (раздел 1)
Младший научный сотрудник	_____ подпись, дата	Р.Р. Мейланов (раздел 1)

РЕФЕРАТ

Отчет содержит 65 с., 11 рис., 1 табл., 64 ист.

ТЕРМОДИНАМИКА, ПРОИЗВОДНЫЕ ДРОБНОГО ПОРЯДКА, УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ, ТЕПЛОПЕРЕНОС, ВЫСОКИЕ ДАВЛЕНИЯ, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, НАНОКРИСТАЛЛ, ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ, ФИЛЬТРАЦИЯ, ЯДРО ЗЕМЛИ

Работа выполнена по Плану Института проблем геотермии и возобновляемой энергетики, филиала Объединенного института высоких температур РАН, направление 3.2: «Физико-технические и экологические проблемы энергетики; тепломассообмен; теплофизические и электрофизические свойства веществ; низкотемпературная плазма и технологии на ее основе» по теме «Моделирование процессов тепломассопереноса и теплофизических свойств мультифазных и структурированных соединений в широком диапазоне состояний, включая экстремальные, присущие внешнему ядру Земли».

Объектами исследования и разработки работы являются экстремальные состояния вещества, создание которых моделируется численными методами и производится сравнительный анализ с экспериментальными данными, полученными в ходе выполнения других, в том числе совместных проектов. Целью работы является моделирование процессов тепломассопереноса и теплофизических свойств мультифазных и структурированных соединений для широкого диапазона состояний. В ходе выполнения проекта получен ряд новых оригинальных результатов, в частности:

1. На основании разработанной ранее разностной схемы для численного решения краевой задачи для системы уравнений неизотермической фильтрации с использованием производной дробного порядка Капуто по времени создан комплекс программного обеспечения и проведено моделирование. Вычислены значения давления и температуры в зависимости от координаты радиуса пласта и времени. Установлено, что в решениях с дробными производными происходит локализация зоны высокого давления и температуры, уменьшение максимума параметров, а также замедление процессов. Доказана устойчивость разработанной разностной схемы.

2. Предложено существенно доработанное малопараметрическое описание температурно-барической зависимости теплопроводности композитных материалов, с большой точностью описывающее поведение теплопроводности горных пород и искусственных соединений на основании минимального набора опорных величин, имеющих достаточно ясный физический смысл. Выявлено, что рост давления, как правило, приводит к снижению температурной зависимости, сама же температурная

зависимость, носит степенной характер, где показатель степени может служить мерой для оценки упорядоченности структуры.

3. Исследована динамика квазипараллельных ударных волн, инициируемых лазерным излучением, в композитных мишенях с первым абляционным слоем пониженной плотности (пена). Обнаружен и объяснен эффект перераспределения давления и температуры и кумуляции в средней области, обусловленный взаимодействием совокупности прямых и отраженных ударных волн. Подтверждён обсуждаемый ранее эффект замедления ударных волн в материалах пониженной плотности и возможность инверсной зависимости эффективной скорости ударной волны от энергии лазерного импульса.

4. На основе трехфазной модели простого вещества и RP-модели нанокристалла, в котором имеются как вакансии в решетке, так и делокализованные атомы, получено выражение для уравнения состояния. Предложена модель поверхности Гиббса, на которой часть ячеек вакантна, а часть атомов находится в делокализованном состоянии. Изучено изменение S-петлей на изотермах уравнения состояния, соответствующих фазовым переходам кристалл-жидкость и жидкость-газ в зависимости от температуры и размера кластера. Показано, что при определенном размере кластера S-петля фазового перехода кристалл-жидкость исчезает.

По результатам исследований по теме за 2019 осуществлено 57 научных публикаций, из них 27 статей в рецензируемых изданиях, 17 из которых входят в основные зарубежные реферативные базы данных (Web of Science и/или Scopus), две из них – в первом, четыре – во втором квартилях.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: (1) оптимизация экспериментальных параметров по результатам модельных расчетов; (2) расчет уравнений состояний вещества; (3) решение задач тепло- и массопереноса. Степень внедрения результатов НИР и их эффективность характеризуется высоким уровнем научных публикаций, их цитируемостью, а также использованием результатов в совместных проектах с ведущими мировыми центрами, подтверждающимся наличием совместных работ. Область применения потенциальных приложений охватывает широкий круг, включающий астрофизику и планетарную физику, материаловедение и прикладную инженерию. Прогнозные предположения о развитии объекта исследования: полученные в ходе выполнения проекта результаты должны улучшить точность экспериментов по изучению экстремальных состояний вещества, а также дать основание на постановку и проведение новых экспериментальных исследований в расширенном диапазоне термодинамических параметров.

ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Уравнение состояния – функциональное уравнение, связывающее термодинамические параметры (давление, температура, объем, химический потенциал) в состоянии термодинамического равновесия. Различают термическое уравнения состояния (связь между термодинамическими параметрами) и калорическое уравнение состояния (связь между термодинамическим потенциалом и термодинамическими параметрами).

Ударная волна – поверхность разрыва, которая движется внутри среды, при этом давление, плотность, температура и скорость испытывают скачок.

Экстремальное состояние вещества – состояние с аномально высокой концентрацией энергии, возникающее под воздействием высоких давлений и/или температур.

Обобщенная термодинамика – термодинамика, построенная на основе математического аппарата дробного исчисления. Результаты обобщенной термодинамики переходят в результаты традиционной термодинамики, когда показатель производной равен единице.

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

ЭОК	электронно-оптическая камера.
УТС	управляемый термоядерный синтез.
ДИ	дробное исчисление;
ДД	дробное дифференцирование;
УС	уравнение состояния;
ПДП	производная дробного порядка;
ППДП	показатель производной дробного порядка;
ТП	термодинамические параметры;
ТХ	термодинамические характеристики;
ТС	теплофизические свойства;
Ж-Г	жидкость-газ
К-Ж	кристалл-жидкость
ФП	фазовый переход

СОДЕРЖАНИЕ

Введение ……..…… 8

1. Численное решение системы дифференциальных уравнений неизотермической фильтрации с дробными производными ……... 10

2. Описание температурно-барической зависимости теплопроводности горных пород ……. 20

3 Экспериментальные результаты исследования взаимодействия квазипараллельных лазерных ударных волн …… 26

4. Разработка трехфазной статистической модели простого вещества ограниченной поверхностью Гиббса …… 33

Заключение……..…… 50

Список использованных источников …….. 53

Список публикаций по НИР за 2019 ……. 58

ВВЕДЕНИЕ

С получением новых материалов, расширением области рабочих параметров веществ в различных технологических процессах, в том числе при освоении возобновляемых источников энергии, а также с существенным прогрессом в измерительной технике появилась необходимость обобщения традиционной термодинамики. Интенсивное развитие математического аппарата дифференцирования дробного порядка началось с развития концепции фрактала, которая, в свою очередь, вносит новый уровень понимания динамики соотношения обратимых и необратимых процессов, открывая тем самым, новое направление в изучении неравновесных процессов. Поставленные же в рамках темы конкретные задачи имеют прикладное значение для моделирования процессов в геотермальных энергетических системах.

Изучение поведения вещества при высоких давлениях и температурах представляет фундаментальный и прикладной интерес в разных областях науки, включая астрофизику, планетологию, геотермию, а также прикладные задачи самых разных отраслей инженерных наук и энергетики. В частности, *P*-*T*-условия на разделе Гуттенберга, т.е. на границе нижней мантии и внешнего ядра Земли, очень трудно создавать экспериментально, поэтому весьма актуальным является теоретический прогноз свойств. Изучение свойств вещества при высоких *P*-*T*-условиях, как для макро-, так и для нано-кристаллов позволит решить многие как фундаментальные, так и прикладные задачи: изучить причины перехода вещества в нанодисперсное состояние при различных экстремальных состояниях (при фазовых переходах, при высоких *P*-*T*-условиях, при механическом трении границ раздела), прогнозировать зависимость термоупругих свойств нанокристалла от размера и формы при различных температурах, выяснить причины пластичного поведения вещества при *P*-*T*-условиях внешнего ядра Земли и др.

В лабораторных условиях экстремальные состояния реализуются только динамическими методами, и такие эксперименты, как правило, дают очень ограниченную, в какой-то степени фрагментальную, информацию и достаточно большую погрешность. В этой связи, не только важными, но и крайне актуальными (при использовании лазерного драйвера) составляющими экспериментального исследования экстремальных состояний вещества является использование численного моделирования процессов взаимодействия мощного лазерного излучения с веществом, генерации, распространения и взаимодействия ударных волн и прочих сопутствующих процессов на всех стадиях исследования, а именно: а) проектирования и постановки экспериментов, включая оптимизацию параметров как лазерного импульса, так и мишени, б) интерпретации

экспериментальных данных с восполнением недостающих параметров по имеющейся ограниченной экспериментальной информации и подстроенными под неё данными моделирования, чему и посвящены соответствующие задачи темы.

В следующих разделах настоящего отчета представлены основные результаты, полученные в соответствии с запланированными на 2019 год исследованиями, а именно:

1) численное решение системы дифференциальных уравнений неизотермической фильтрации с дробными производными, включающее математическую задачу получения разностной схемы численного решения краевой задачи для системы уравнений неизотермической фильтрации с использованием производной дробного порядка Капуто по времени, ее доказательство и обсуждение результатов численного моделирования исследуемых процессов для разных показателей дробного дифференцирования;

2) описание температурно-барической зависимости теплопроводности горных пород с предложенным и существенно доработанным в этом году малопараметрическим описанием;

3) анализ экспериментальных данных по взаимодействию квазипараллельных лазерных ударных волн;

4) разработанную трехфазную статистическую модель простого вещества ограниченной поверхностью Гиббса.

Помимо этого совместно с коллегами из Дагестанского государственного университета проведены исследования возможности получения высоких температур в плазме газового разряда высокого давления. Продолжены работы по расчету термодинамических характеристик веществ, имеющих фундаментальное и прикладное значение, на основе фрактального уравнения состояния. Проведены исследования по объяснению электрических свойств конденсированного состояния в рамках фрактального подхода. В рамках трехфазной статистической модели простого макро-вещества исследованы размерные зависимости теплофизических свойств золота и ниобия в изобарических условиях. Исходя из экспериментальных данных по отношению рамановских частот в изотопно-различных алмазах, определены параметры парного потенциала межатомного взаимодействия для изотопа углерода 13. Результаты будут представлены в следующих отчетах.

1. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ФИЛЬТРАЦИИ С ДРОБНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ

Как известно, фундаментальные вопросы, связанные с исследованиями движения жидкости в пористых средах, актуальны на сегодняшний день. На актуальность их и указывают многочисленные исследования в этой области [1-7]. Как указано в работах [4-7], особенности многофазных пористых структур приводят к сложной природе явлений тепломассопереноса, для которых характерны нелокальные эффекты памяти, сильных пространственных корреляций и самоорганизации.

Для нелинейного закона Дарси имеет место следующее уравнение

$$v = -\frac{\kappa}{\mu} gradP + F(v, P, T, \varepsilon),$$

где $v-$ скорость фильтрации, $P-$ давление, $T-$ температура, $\varepsilon-$ параметр, характеризующий свойства флюида и пласта, $F(v, P, T, \varepsilon)-$ некоторая нелинейная функция, зависящая от этих параметров. В известных монографиях [1-3] приведены конкретные уравнения нелинейного закона Дарси. В монографии [1] приведены решения конкретных задач неизотермической фильтрации, установлена пороговая связь между скоростью фильтрации и градиентом давления. Как отмечено в работе [4], закон Дарси имеет более сложную природу, выходящую и за рамки нелинейной фильтрации.

При разработке математических моделей процессов переноса в сложных системах актуальными являются модели, описывающие дробными дифференциальными уравнениями. При этом параметр дробной производной позволяет учитывать нелокальности по времени (эффект памяти), по координате (пространственные корреляций), приводящие к проявлению процессов самоорганизации [4,5]. Численному исследованию задачи Дирихле для уравнения Пуассона посвящена работа [6]. В работе [7] численно исследована задача Стефана с дробной производной Caputo по времени и проведен вычислительный эксперимент по анализу полученных решений.

Здесь [5] нами подробно проведено численное исследование процессов неизотермической фильтрации во фрактальных средах. В качестве математической модели неизотермической фильтрации во фрактальных средах в работах рассмотрена следующая задача:

В области $D=\{(r,t):0<r<L,0<t\le t_{кон}\}$ найти решение краевой задачи для системы дифференциальных уравнений неизотермической фильтрации с дробной производной по времени

$$\partial_{0t}^{\alpha}P(r,t)-\frac{\partial}{\partial r}\left(D_P(P,T)\frac{\partial P(r,t)}{\partial r}\right)=\beta\cdot\partial_{0t}^{\alpha}T(r,t), \tag{1.1}$$

$$\partial_{0t}^{\alpha}T(r,t)-\frac{\partial}{\partial r}\left(D_T(P,T)\frac{\partial T(r,t)}{\partial r}\right)=\gamma\cdot\partial_{0t}^{\alpha}P(x,t), \tag{1.2}$$

$$P(x,0)=P_0,\quad T(x,0)=T_0, \tag{1.3}$$

$$P(0,t)=d_1=const,\quad \left.\frac{\partial P(r,t)}{\partial r}\right|_{r=L}=0, \tag{1.4}$$

$$T(0,t)=d_2=const,\quad \lambda_{пл}\left.\frac{\partial T(r,t)}{\partial r}\right|_{r=L}=\lambda_{гр}\left.\frac{\partial T_{гр}(r,t)}{\partial r}\right|_{r=L}, \tag{1.5}$$

где $\partial_{0t}^{\alpha}T(x,t)=\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\int_0^{\tau}\frac{T'(x,z)}{(t-z)^{\alpha}}dz$ - производная Caputo [10], $0<\alpha<1$, P - давление, T – температура, $D_P(P,T)>0$ и $D_T(P,T)>0$ - заданные функции, зависящие от давления и температуры, γ - коэффициент изотермической сжимаемости, β - коэффициент теплового расширения, r - радиальная координата, $\lambda_{пл}$ - коэффициент теплопроводности пласта, $\lambda_{гр}$ - коэффициент теплопроводности внешнего пласта.

Краевую задачу для системы (1.1)-(1.4) будем решать численным методом. Для этого в области $\overline{D}=\{(r,t):0\le r\le L,0\le t\le t_{кон}\}$ введем сетку:

$$\varpi_{h\tau}=\left\{(r_m,t_n):r_i=mh,t_n=n\tau,m=0,1,\dots,K,h=\frac{L}{K},n=0,1,\dots,N,\tau=\frac{t_{кон}}{N}\right\},$$

с шагом h по r и τ по t.

Для производной $\partial_{0t}^{\alpha}u$ имеет место разностная аппроксимация [8]

$$\left(\partial_{0t}^{\alpha}u\right)_n=\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)\tau}\sum_{k=1}^{n}(u^{k+1}-u^k)\left(t_{n-k+1}^{1-\alpha}-t_{n-k}^{1-\alpha}\right)+O(\tau). \tag{1.5}$$

Для производной целого порядка $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ имеет место следующая разностная аппроксимации:

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_m = \frac{u_{m+1} - 2u_m + u_{m-1}}{h^2} + O(h^2)\,. \qquad (1.6)$$

С учетом соотношений (1.5), (1.6) получим следующую разностную схему с весами, аппроксимирующую задачу (1.1)-(1.4).

$$\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)\tau}\sum_{k=0}^{n}\left(P_m^{k+1} - P_m^k\right)\left(t_{n-k+1}^{1-\alpha} - t_{n-k}^{1-\alpha}\right) = \sigma_1 \cdot \frac{1}{h}\left(g_{m+1}^{n+1}\frac{P_{m+1}^{n+1} - P_m^{n+1}}{h} - g_m^{n+1}\frac{P_m^{n+1} - P_{m-1}^{n+1}}{h}\right) +$$
$$+(1-\sigma_1)\cdot\frac{1}{h}\left(g_{m+1}^{n}\frac{P_{m+1}^{n} - P_m^{n}}{h} - g_m^{n+1}\frac{P_m^{n} - P_{m-1}^{n}}{h}\right) + \frac{\beta}{\Gamma(2-\alpha)\tau}\sum_{k=0}^{n-1}(T_m^{k+1} - T_m^k)\left(t_{n-k+1}^{1-\alpha} - t_{n-k}^{1-\alpha}\right), \qquad (1.7)$$

$$\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)\tau}\sum_{k=0}^{n}(T_m^{k+1} - T_m^k)\left(t_{n-k+1}^{1-\alpha} - t_{n-k}^{1-\alpha}\right) = \sigma_2\frac{1}{h}\left(v_{m+1}^{n+1}\frac{T_{m+1}^{n+1} - T_m^{n+1}}{h} - v_m^{n+1}\frac{T_m^{n+1} - T_{m-1}^{n+1}}{h}\right) =$$
$$+(1-\sigma_2)\cdot\frac{1}{h}\left(v_{m+1}^{n+1}\frac{T_{m+1}^{n} - T_m^{n}}{h} - v_m^{n+1}\frac{T_m^{n} - T_{m-1}^{n}}{h}\right) + \frac{\gamma}{\Gamma(2-\alpha)\tau}\sum_{k=0}^{n-1}(P_m^{k+1} - P_m^k)\left(t_{n-k+1}^{1-\alpha} - t_{n-k}^{1-\alpha}\right), \qquad (1.8)$$

$$P_i^0 = P_0,\ T_i^0 = T_0, \qquad (1.9a)$$

$$P_0^n = d_1,\ \ T_0^n = d_2, \qquad (1.9b)$$

$$P_K^n = P_{K-1}^n, \qquad (1.9c)$$

где $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2)$ - весовые параметры.

Будем предполагать, что градиент температуры в граничном пласте $\frac{\partial T_{гр}}{\partial r} = \frac{T_{гр}^2 - T_{гр}^1}{r_2 - r_1} = \xi = const,$ то есть скорость теплового потока будем считать постоянной величиной, тогда

$$T_K^n = T_{K-1}^n + h\cdot\frac{\lambda гр\,\xi}{\lambda_{пл}}, \qquad (1.9d)$$

где

$$g_m^n = \frac{(D_P)_{m-1}^n + (D_P)_m^n}{2},\ \ v_m^n = \frac{(D_T)_{m-1}^n + (D_T)_m^n}{2}.$$

В случае, когда $\sigma = 0$, систему (1.7), (1.8), (1.9) можно привести к виду

$$a_m P_{m-1}^{n+1} - c_m P_m^{n+1} + b_m P_{m+1}^{n+1} = -(2^{1-\alpha)} - 2)P_m^n + \varphi_m^n,$$

$$a_m^* T_{m-1}^{n+1} - c_m^* T_m^{n+1} + b_m^* T_{m+1}^{n+1} = -(2^{1-\alpha} - 2)T_m^n + \psi_m^n, \qquad (1.10)$$

где

$$a_m = \Gamma(2-\alpha)\cdot\tau^\alpha \frac{g_{m+1}^{n+1}}{h^2},\ b_m = \Gamma(2-\alpha)\cdot\tau^\alpha \cdot \frac{g_m^n}{h^2},\ c_m = 1 + \frac{g_m^{n+1} + g_{m+1}^{n+1}}{h^2},$$

$$\varphi_m^n = -\tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot P_m^k +$$

$$+\beta\cdot\tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot T_m^k .$$

$$a_m^* = \Gamma(2-\alpha)\cdot\tau^\alpha \frac{v_{m+1}^{n+1}}{h^2},\ b_m^* = \Gamma(2-\alpha)\cdot\tau^\alpha \cdot \frac{v_m^{n+1}}{h^2},\ c_m^* = 1 + \frac{v_m^{n+1} + v_{m+1}^{n+1}}{h^2},$$

$$\psi_m^n = -\tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot T_m^k +$$

$$+\gamma\cdot\tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot P_m^k .$$

Легко проверить, что достаточные условия хорошей обусловленности системы (1.10) при фиксированном *n* выполняются. Система разностных уравнений (1.10) совместно с краевыми условиями (1.9b), (1.9c), (1.9d) при фиксированном *n* имеет единственное решение и его можно найти методом прогонки.

Сходимость разностной схемы докажем методом замороженных коэффициентов.

Разностную схему (1.7), (1.8), (1.9) запишем в операторном виде

$$(E + \sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha A)P^{n+1} + \\ + ((2^{1-\alpha} - 2)E - (1-\sigma_1)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha A)P^n - \varphi^n = 0, \qquad (1.11)$$

$$(E + \sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha B)T^{n+1} + \\ + ((2^{1-\alpha} - 2)E + (1-\sigma_2)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha B)T^n - \psi^n = 0, \qquad (1.12)$$

$$P_i^0 = P_0,\ T_i^0 = T_0,$$

$$P_0^n = d_1,\ \ T_0^n = d_2, \qquad (1.13)$$

$$P_K^n = P_{K-1}^n,\ T_K^n = T_{K-1}^n + h\frac{\lambda_{гр.}\xi}{\lambda_{пл.}}.$$

где $P^n = (P_1^n, P_2^n, ..., P_{M-1}^n)$, $T^n = (T_1^n, T_2^n, ..., T_{M-1}^n)$, $\varphi^n = (\varphi_1^n, \varphi_2^n, ..., \varphi_{N-1}^n)^T$,

$T^0 = (T_0(r_1), T_0(r_2), ..., T_0(r_{M-1}))^T$, $P^0 = (P_0(r_1), P_0(r_2), ..., P_0(r_{M-1}))^T$,

$$(AP)_m = -\left(\frac{g_{m+1}}{h^2}P_{m+1} - \frac{g_{m+1}+g_m}{h^2}P_m + \frac{g_m}{h^2}P_{m-1}\right),$$

$$(BT)_m = -\left(\frac{v_{m+1}}{h^2}T_{m+1} - \frac{v_{m+1}+v_m}{h^2}T_m + \frac{v_m}{h^2}T_{m-1}\right).$$

Разрешимость уравнений (1.11), (1.12) относительно P^{n+1} и T^{n+1} эквивалентна обратимости операторов $E + \sigma_1 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha A$ и $E + \sigma_2 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha B$.

Собственные значения матриц A и B положительные, т.е. $\lambda(A)_k > 0, \lambda(B)_k > 0$, расположим их в порядке возрастания $\lambda_1 < \lambda_2 < ... < \lambda_{N-1}$. Положительность собственных значений следует из того, что матрицы A *и* B трехдиагональные и $g_m > 0,\ v_m > 0,\ m = 0,1,...,K$ Операторы $E + \sigma_1 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha A$ и $E + \sigma_2 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha B$ будут иметь обратные, если потребовать $1 + \sigma_1 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha \lambda(A)_k > 0$, $1 + \sigma_2 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha \lambda(B)_k > 0$ *k=1,2,...,N-1*, где $\lambda(A)_k > 0, \lambda(B)_k > 0$ собственные числа операторов *A и B.*

При каждом *n* решения $P_m^n = P(r_m, t_n)$ и $T_m^n = T(r_m, t_n)$ можно представить в виде

$$P(r_m, t_n) = \sum_{s=1}^{M-1} c_s(t_n)\mu_s(r_m),\ T(r_m, t_n) = \sum_{s=1}^{M-1} d_s(t_n)\mu_s(r_m). \qquad (1.14)$$

Здесь $c_s(t_n)$ и $d_s(t_n)$ - коэффициенты Фурье функций $P(r_m, t_n)$, $T(r_m, t_n)$ соответственно. Подставляя (1.14) в уравнения (1.7), (1.8) и учитывая, что $(\mu_s(r))_{\overline{rr},m} = -\lambda_s \mu_s(r_m)$ и $\mu_s(r)$ линейно-независимые, получим

$$\begin{cases} \left(1 + \sigma_1 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha \lambda(A)_s\right) \cdot c_s(t_{n+1}) + \\ \qquad + \left((2^{1-\alpha} - 2) - (1-\sigma_1)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha \lambda(A)_s\right) c_s(t_n) + \overline{\varphi}_s(t_n) = 0, \\ \left(1 + \sigma_2 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha \lambda(B)_s\right) d_s(t_{n+1}) + \\ \qquad + \left((2^{1-\alpha} - 2) - (1-\sigma_2)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha \lambda(B)_s\right) d_s(t_n) + \overline{\psi}_s(t_n) = 0, \end{cases} \qquad (1.15)$$

где

$$\overline{\varphi}_s(t_n) = \tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot c_s(t_k) +$$

$$-\beta\cdot\tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot d_s(t_k).$$

$$\overline{\psi}_s(t_n) = \tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot d_s(t_k) +$$

$$-\beta\cdot\tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot c_s(t_k).,$$

n= 0,1,…,N-1, S=1,2,…,M-1.

Система уравнений (15) при каждом s представляет собой систему разностных уравнений относительно $c^{(n)} = c_s(t_n)$ и $d^{(n)} = d_s(t_n)$. Чтобы найти единственное решение, зададим начальные условия $c_s(0) = (P^0, \mu_s)$, $d_s(0) = (T^0, \mu_s)$.

Из уравнений (1.15) получим

$$c_s(t_{n+1}) = \frac{(2-2^{1-\alpha}) - (1-\sigma_1)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}{1+\sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}c_s(t_n) +$$

$$+\frac{1}{1+\sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}\overline{\varphi}_s(t_n),$$

$$d_s(t_{n+1}) = \frac{(2-2^{1-\alpha}) - (1-\sigma_2)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}{1+\sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}c_s(t_n) +$$

$$+\frac{1}{1+\sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}\overline{\psi}_s(t_n). \qquad (1.16)$$

Учитывая (1.16), решение P_m^{n+1} и T_m^{n+1} задачи запишем в виде

$$P_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[p_s\cdot c_s(t_n) + q_s\cdot\overline{\varphi}_s(t_n)\right]\mu_s(r_m),$$

$$T_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[p_s^{(1)}\cdot d_s(t_n) + q_s^{(1)}\cdot\overline{\psi}_s(t_n)\right]\mu_s(r_m),$$

где

$$p_s = \frac{2-2^{1-\alpha} - (1-\sigma_1)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}{1+\sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}, \quad q_s = \frac{1}{1+\sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s},$$

$$p_s^{(1)} = \frac{2-2^{1-\alpha}-(1-\sigma_2)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}{1+\sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s},\ q_s^{(1)} = \frac{1}{1+\sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}.$$

Обозначая,

$$\overline{P}_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[p_s\cdot c_s(t_n)\right]\mu_s(r_m),\ \tilde{P}_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[q_s\cdot\overline{\varphi}_s(t_n)\right]\mu_s(r_m),$$

$$\overline{T}_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[p_s^{(1)}\cdot d_s(t_n)\right]\mu_s(r_m),\ \tilde{T}_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[q_s^{(1)}\cdot\overline{\psi}_s(t_n)\right]\mu_s(r_m),$$

получим, что

$$P_m^{n+1} = \overline{P}_m^{n+1} + \tilde{P}_m^{n+1} \tag{1.17}$$

$$T_m^{n+1} = \overline{T}_m^{n+1} + \tilde{T}_m^{n+1} \tag{1.18}$$

В силу ортонормированности базиса $\{\mu_s\}$ получаем

$$\left\|\overline{P}^{n+1}\right\|^2 = \sum_{m=1}^{M-1}\left(\overline{P}_m^{n+1}\right)^2 h \le \sum_{s=1}^{M-1} p_s^2\cdot\left(c_s(t_n)\right)^2,$$

$$\left\|\overline{T}^{n+1}\right\|^2 = \sum_{m=1}^{M-1}\left(\overline{T}_m^{n+1}\right)^2 h \le \sum_{s=1}^{M-1}\left(p_s^{(1)}\right)^2\cdot\left(d_s(t_n)\right)^2.$$

Следовательно,

$$\left\|\overline{P}^{n+1}\right\| \le \left(\sum_{s=1}^{M-1}\left(c_s(t_n)\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}\max|p_s| = \left\|P^n\right\|\max_{1\le S\le M-1}|p_s|, \tag{1.19}$$

$$\left\|\overline{T}^{n+1}\right\| \le \left(\sum_{s=1}^{M-1}\left(d_s(t_n)\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}\max\left|p_s^{(1)}\right| = \left\|T^n\right\|\max_{1\le S\le M-1}\left|p_s^{(1)}\right|. \tag{1.20}$$

Потребуем выполнения условий

$$|p_s| = \left|\frac{2-2^{1-\alpha}-(1-\sigma_1)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}{1+\sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}\right| \le 1,\ s=1,2,\ldots,M-1, \tag{1.21}$$

$$\left|p_s^{(1)}\right| = \left|\frac{2-2^{1-\alpha}-(1-\sigma_2)\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}{1+\sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}\right| \le 1,\ s=1,2,\ldots,M-1. \tag{1.22}$$

Условия (1.21) и (1.22) эквивалентны условиям

$$\sigma_1 \ge \frac{1}{2} - \frac{3-2^{1-\alpha}}{2\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(A)_s}, \quad \sigma_2 \ge \frac{1}{2} - \frac{3-2^{1-\alpha}}{2\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(B)_s}. \qquad (1.23)$$

Из (1.21) и (1.22) при любом $s = 1,2,\ldots,M-1$ следуют неравенства:

$$1+\sigma_1 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(A)_s \ge \frac{\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(A)_s}{2} + \frac{2^{1-\alpha}-1}{2} > 0,$$

$$1+\sigma_2 \cdot \Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(B)_s \ge \frac{\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(B)_s}{2} + \frac{2^{1-\alpha}-1}{2} > 0,$$

Оценим функции

$$\tilde{P}_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[q_s\,\overline{\varphi}_s(t_n)\right]\mu_s(r_m),$$

$$\tilde{T}_m^{n+1} = \sum_{s=1}^{M-1}\left[q_s^{(1)}\,\overline{\psi}_s(t_n)\right]\mu_s(r_m).$$

Для этого потребуем выполнение условий

$$\begin{aligned} \sigma_1 &\ge \frac{1}{2} - \frac{(1-\varepsilon_1)(3-2^{1-\alpha})}{\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(A)_{N-1}}, \\ \sigma_2 &\ge \frac{1}{2} - \frac{(1-\varepsilon_2)(3-2^{1-\alpha})}{\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(B)_{N-1}}. \end{aligned} \qquad (1.24)$$

где $0<\varepsilon_1<1,\ 0<\varepsilon_2<1,\ s=1,2,\ldots,M-1$. Отсюда следует выполнение условий (1.23).

Из (1.24) получим

$$1+\sigma\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda_s \ge \frac{\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda_s}{2} + 1 - \frac{(1-\varepsilon)(3-2^{1-\alpha})\lambda_s}{2\lambda_{N-1}} >$$

$$> 1 - \frac{(1-\varepsilon)(3-2^{1-\alpha})}{2} > 1 - \frac{(1-\varepsilon)\cdot 2}{2} = \varepsilon > 0.$$

Теперь оценим функции

$$\tilde{P}_m^{n+1} = -\sum_{s=1}^{M-1}\left[\frac{1}{1+\sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(A)_s}\cdot\left(\Delta_\tau^{\alpha}c_s(t_n) - \beta\Delta_\tau^{\alpha}d_s(t_n)\right)\right]\cdot\mu_s(r_m),$$

$$\tilde{T}_m^{n+1} = -\sum_{s=1}^{M-1}\left[\frac{1}{1+\sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^{\alpha}\lambda(B)_s}\cdot\left(\Delta_\tau^{\alpha}d_s(t_n) - \gamma\Delta_\tau^{\alpha}c_s(t_n)\right)\right]\cdot\mu_s(r_m),$$

где

$$\Delta_\tau^{\alpha}c_s(t_n) = \tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot c_s(t_k),$$

$$\Delta_\tau^\alpha d_s(t_n) = \tau^{\alpha-1}\sum_{k=0}^{n-1}(t_{n-k+2}^{1-\alpha} - 2t_{n-k+1}^{1-\alpha} + t_{n-k}^{1-\alpha})\cdot c_s(t_k)\,.$$

Отсюда следует

$$\left\|\tilde{P}^{n+1}\right\|^2 \le 2\sum_{s=1}^{M-1}\left(\frac{1}{1+\sigma_1\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(A)_s}\right)^2\left(\left(\Delta_\tau^\alpha c_s(t_n)\right)^2 + (\Delta_\tau^\alpha d_s(t_n))^2\right),$$

$$\left\|\tilde{T}^{n+1}\right\|^2 \le 2\sum_{s=1}^{M-1}\left(\frac{1}{1+\sigma_2\cdot\Gamma(2-\alpha)\tau^\alpha\lambda(B)_s}\right)^2\left(\left(\Delta_\tau^\alpha d_s(t_n)\right)^2 + (\Delta_\tau^\alpha c_s(t_n))^2\right)$$

Тогда

$$\left\|\tilde{P}^{n+1}\right\| \le \frac{2}{\varepsilon}\cdot\left(\left\|\Delta_\tau^\alpha c_s(t_n)\right\| + \left\|\Delta_\tau^\alpha d_s(t_n)\right\|\right),$$

$$\left\|\tilde{T}^{n+1}\right\| \le \frac{2}{\varepsilon}\cdot\left(\left\|\Delta_\tau^\alpha d_s(t_n)\right\| + \left\|\Delta_\tau^\alpha c_s(t_n)\right\|\right).$$

Имеем

$$\left\|\Delta_\tau^\alpha c_s(t_n)\right\| \le \sum_{k=1}^{n-1}\left\|\left(c_s(t_{k+1}) - c_s(t_k)\right)\right\|\left((n-k+1)^{1-\alpha} - (n-k)^{1-\alpha}\right) \le$$

$$\le M_1\cdot\tau\sum_{k=1}^{n-1}((n-k+1)^{1-\alpha} - (n-k)^{1-\alpha}) \le M_1\cdot\tau\cdot(n^{1-\alpha} - 2^{1-\alpha}) \le M_1\cdot\tau\cdot n^{1-\alpha} =$$

$$= M_1\tau\cdot\left(\frac{t_{кон.}}{\tau}\right)^{1-\alpha} = M_1\cdot t_{кон}^{1-\alpha}\cdot\tau^\alpha,$$

и

$$\left\|\Delta_\tau^\alpha d_s(t_n)\right\| \le M_2\cdot t_{кон.}^{1-\alpha}\cdot\tau^\alpha,$$

где $M_1 = \max\left|c_s^{/}(t)\right| = const, M_2 = \max\left|d_s^{/}(t)\right| = const$.

Следовательно,

$$\left\|\tilde{P}^{n+1}\right\| \le \frac{2M_1 t_{кон}^{1-\alpha}\tau^\alpha}{\varepsilon_1}, \quad \left\|\tilde{T}^{n+1}\right\| \le \frac{2M_2 t_{кон}^{1-\alpha}\tau^\alpha}{\varepsilon_2} \tag{1.25}$$

Тогда воспользовавшись оценками (1.19), (1.20), (1.25), равенствами (1.17) , (1.18) и свойствами нормы, окончательно получим оценки

$$\left\|P^{n+1}\right\| \le \left\|P^n\right\| + \frac{M_1 t_{кон}^{1-\alpha}\tau^\alpha}{\varepsilon_1},\ \left\|T^{n+1}\right\| \le \left\|T^n\right\| + \frac{M_2 t_{кон}^{1-\alpha}\tau^\alpha}{\varepsilon_2}.$$

Отсюда следует, что разностная схема (1.7)-(1.9) устойчива. Кроме того, легко проверить, что она аппроксимирует задачу (1.1)-(1.4) с порядком $O(h^2+\tau)$.

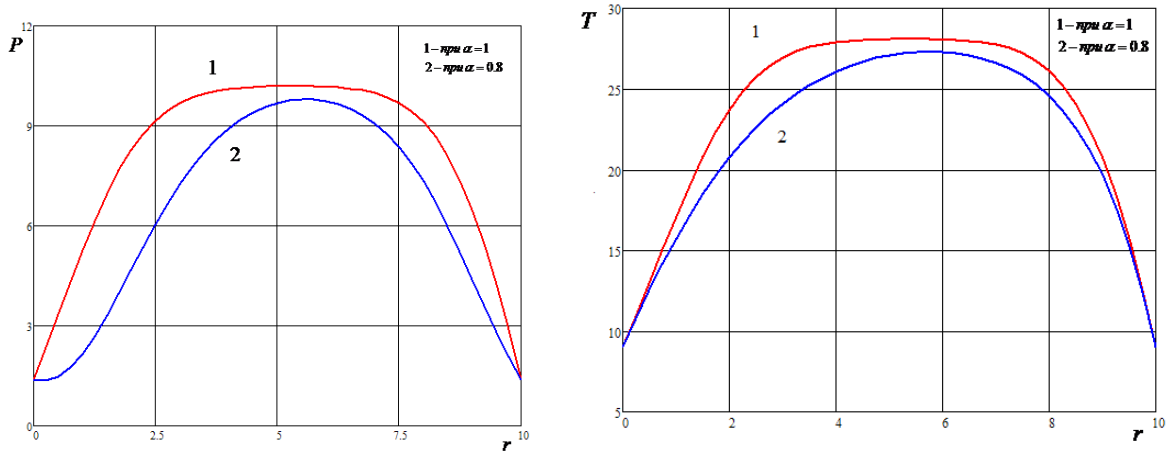


Рисунок 1.1. Динамика изменения давления (слева) и температуры (справа) в пласте в зависимости от координаты по радиусу пласта (1- при $\alpha = 1$, 2- при $\alpha = 0.8$).

ВЫВОДЫ

На рисунке 1.1 приведены графики распределения давления и температуры в зависимости от координаты радиуса пласта. Как видим на рисунка, при переходе к дробным производным происходит локализация зоны высокого давления и температуры и уменьшение максимума давления и температуры. Кроме того во фрактальных средах, в отличие от сплошных сред, все физические процессы протекают медленнее. Во фрактальных средах для движения частицы не все направления доступны, то есть случайно блуждающая частица удаляется от места старта медленнее. Замедление процессов тепломассопереноса и фильтрации во фрактальных средах настолько существенно, что физические величины начинают изменяться медленнее первой производной и учесть этот эффект можно только в интегрально – дифференциальном уравнении, содержащем производную по времени дробного порядка.

2. ОПИСАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНО-БАРИЧЕСКОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ГОРНЫХ ПОРОД

Описание и предсказание поведения температурно-барической зависимости естественных и искусственных многокомпонентных композитных материалов является важным для множества приложений, как связанных с науками о Земле (геология, геотермия), так и с прикладными задачами различных отраслей инженерии.

Влияние давления на теплопроводность твердых тел обычно рассматривается, основываясь на формуле Лейбфрида-Шлемана [11]:

$$\lambda = const \frac{Ma\theta^3}{\gamma^2 T} \tag{2.1}$$

где M–молекулярный вес, a – постоянная решетки, θ – температура Дебая, γ –параметр Грюнайзена.

Согласно выражению (2.1) давление должно приводить к линейному росту величины решёточной теплопроводности. Однако экспериментальные барические зависимости теплопроводности полупроводников и горных пород, как правило, носят нелинейный характер. Особенно это касается начальной области 0.1-100 МПа. Вместе с тем эта (как и прилегающая к ней) область представляет как фундаментальный, так и прикладной интерес.

В неупорядоченных кристаллических твёрдых телах атомы занимают правильное положение в узлах кристаллической решётки, но порядок расположения атомов различных сортов не соблюдается. В результате массы атомов и их силовые константы беспорядочно меняются от узла к узлу, что вызывает рассеяние тепловых волн. Помимо этого, значительное влияние на величину λ эффективной теплопроводности оказывают границы блоков и дефекты кристаллической решётки. Все это в многокомпонентных структурах со сложной и вариативной упорядоченностью приводит к сложному характеру процесса теплопереноса, описание которого представляет научный интерес и имеет практическое значения для широкого диапазона приложений. [12]

Анализ экспериментальных и теоретических работ показал, что температурная зависимость теплопроводности большого класса соединений хорошо описывается степенным законом $\lambda \sim T^n$, в котором показатель степени n в (1) находится в пределах от –1 до +0.5. Значение n=–1 относится к достаточно чистым кристаллическим диэлектрикам

с волновым механизмом переноса тепла [13-15], а $n \approx 0.5$ – к аморфным твёрдым телам с активационным механизмом переноса тепла.

Таблица 2.1. Теплопроводность (Вт/К·м).

T, K	**давление МПа**								
	0.1	**50**	**100**	**150**	**200**	**250**	**300**	**350**	**400**
гранит									
273	3.61	3.82	3.93	3.99	4.02	4.06	4.14	4.16	4.18
323	3.20	3.40	3.53	3.59	3.66	3.71	3.78	3.81	3.83
373	2.88	3.09	3.18	3.25	3.38	3.44	3.51	3.53	3.56
423	2.63	2.83	2.97	2.99	3.15	3.21	3.28	3.30	3.33
473	2.43	2.62	2.77	2.82	2.92	3.03	3.09	3.12	3.12
523	2.26	2.45	2.60	2.73	2.80	2.87	2.93	2.96	2.96
n	-0.72	-0.68	-0.63	-0.58	-0.56	-0.53	0-.53	-0.52	-0.51
песчаник									
273	2.05	2.21	2.23	2.26	2.27	2.277	2.283	2.288	2.292
323	1.93	2.14	2.15	2.18	2.19	2.20	2.21	2.215	2.22
373	1.84	2.059	2.10	2.12	2.13	2.14	2.15	2.155	2.16
423	1.766	2.02	2.04	2.06	2.08	2.09	2.097	2.104	2.109
473	1.702	1.94	2.00	2.02	2.035	2.044	2.052	2.059	2.065
523	1.647	1.92	1.95	1.97	1.98	2.004	2.013	2.02	2.026
n	-0.322	-0.227	-0.198	-0.204	-0.204	-0.188	-0.187	-0.186	-0.192
мергель									
273	1.63	1.82	1.98	2.04	2.07	2.09	2.11	2.13	2.15
323	1.75	1.93	2.10	2.16	2.19	2.21	2.23	2.25	2.27
373	1.85	2.03	2.20	2.27	2.30	2.32	2.34	2.36	2.38
423	1.94	2.12	2.30	2.37	2.40	2.42	2.44	2.46	2.48
473	2.02	2.21	2.39	2.46	2.49	2.5	2.53	2.55	2.57
523	2.10	2.29	2.47	2.55	2.58	2.60	2.62	2.645	2.66
n	0.368	0.353	0.343	0.343	0.340	0.336	0.33	0.333	0.330

Многокомпонентные поликристаллические диэлектрики, у которых имеются большое количество дефектов и нарушения симметрии кристаллической решётки, также подчиняются степенному закону с характерной величиной $n \approx -0.5$ [11]. В общем случае, величина и знак показателя n даёт возможность оценить кристаллическую структуру исследуемого материала и преобладающие в нем процессы теплопереноса. Построению модели теплопроводности горных пород и искусственных композитных материалов в области 0-400 МПа на основе анализа экспериментальных зависимостей и была посвящена работа, часть результатов которой представлены в данной главе настоящего отчета.

Измерения в области температур 273-523 К и давления от 0.1 до 400 МПа проводились абсолютным стационарным методом, погрешность которого не превышала 3-4%. [16]

Для подробного анализа экспериментальных температурной и барической зависимостей теплопроводности мы взяли данные следующих горных пород: гранита (Республика Дагестан, глубина залегания 3020 – 3090 м, пористость 1%, плотность $\rho = 3.2 \cdot 10^3 кг / м^3$) [16], мелкозернистого песчаника (Республика Дагестан, глубина залегания 4900 - 4950м, открытая пористость 7% , плотность $\rho = 2.28\ 10^3$ кг м $^{-3}$) [18], и мергеля (Сухокумское нефтегазовое м/р, Скв. №22, глубина залегания 3815 м, пористость 11.3% и плотность $\rho = 2.57 \cdot 10^3 кг / м^3$) [19]. Барическая зависимость n исследованных образцов также представлена в таблице 2.1.

Применив степенной закон как к переменной (T), так и для фиксированной (T_0) температурам, можно перейти к безразмерным величинам [20]:

$$\lambda(T, P) = \lambda(T_0, P) \cdot \left(\frac{T}{T_0} \right)^{n(P)}, \qquad (2.2)$$

где $\lambda(T_0, P)$ представляет собой барическую зависимость теплопроводности при фиксированной температуре T_0.

Зависимости $n(P)$ для рассматриваемых образцов приведены на рис. 1а. Представленные символами значения $n(P)$ рассчитывались по экспериментальным температурным зависимостям для каждого давления методом наименьших квадратов.

Особо следует обратить, внимание на то, что коэффициент n в выражении (2.2) является объективным параметром, зависящим от давления и не зависящим от выбора температуры T_0. С помощью безразмерной функции:

$$f(P) = \frac{\lambda(T_0, P)}{\lambda(T_0, P_0)}\ , \tag{2.3}$$

перепишем (2.2) в виде:

$$\lambda(T, P) = \lambda(T_0, P_0) \cdot f(P) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{n(P)}. \tag{2.4}$$

Будучи безразмерной, функция $f(P)$ удобна для сравнительного анализа различных материалов, абсолютные значения теплопроводности которых могут различаться более чем на порядок.

Безразмерные функции $n(P)$ и $f_{T_0}(P)$ удобны для сравнительного анализа различных материалов, абсолютные значения теплопроводности которых могут различаться в общем случае более чем на порядок. В рассматриваемом диапазоне давлений атмосферное давление 0.1 МПа близко к нулевому, поэтому с достаточно высокой точностью им можно пренебречь. Следует особо отметить, что коэффициент n является объективным параметром, зависящим от давления и не зависящим от выбора температуры T_0 , в то время как $f_{T_0}(P)$ параметрически зависит от T_0.

Барическая зависимость n исследованных образцов также представлена в таблице 2.1. Как видно из таблицы, для гранита и песчаника знак n отрицательный, для мергеля – положительный. Если входящие в уравнение (2.2) барические функции представить в виде:

$$f_{T_0}(P) = 1 + \delta_{T_0}(P),\ n(P) = n_0 \cdot (1 - \nu(P)), \tag{2.4}$$

то само уравнение может быть переписано в виде:

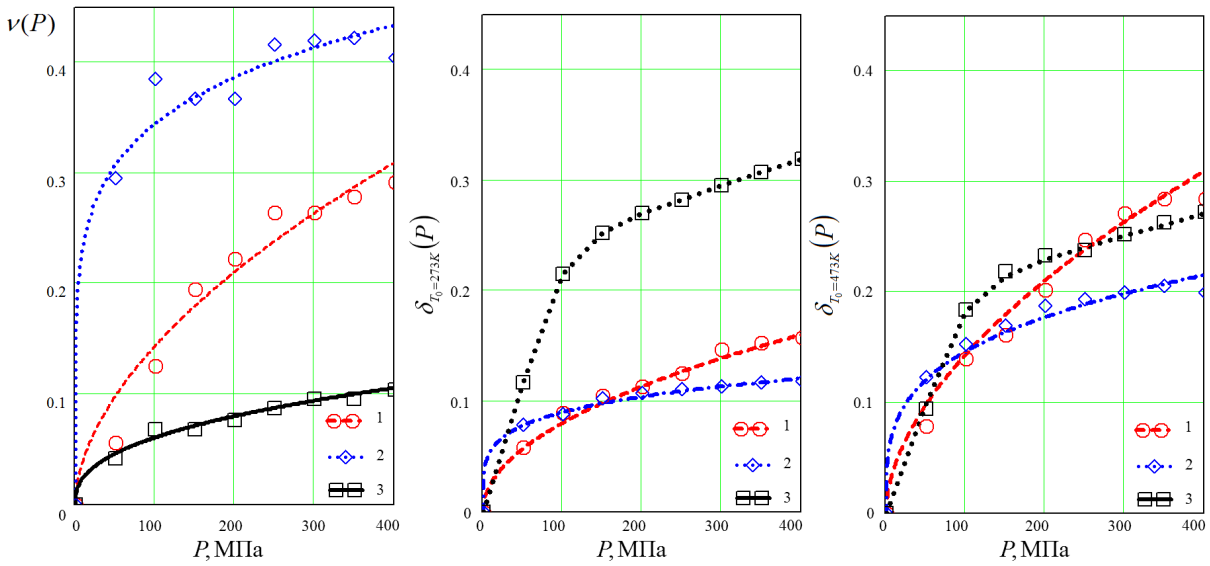
$$\lambda(T, P) = \lambda(T_0, 0) \cdot \left(1 + \delta_{T_0}(P)\right) \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{n_0 \cdot (1 - \nu(P))} \tag{2.5}$$

Форма (5) более удобна для сравнительного анализа различных материалов, абсолютные значения теплопроводности которых могут различаться в общем случае более чем на порядок. Такое представление позволяет выделить всего две опорные величины $n_0 = n(0)$ и $\lambda(T_0, 0)$, и две безразмерные барические функции $\nu(P)$ и $\delta_{T_0}(P)$. Следует отметить, что рассматриваемом диапазоне давлений атмосферным давлением (0.1 МПа) можно пренебречь.

Оговорим физический смысл входящих в уравнение (2.5) величин. Абсолютное значение и знак n_0 определяет меру упорядоченности композитного соединения при нулевом давлении. Значение ≤ -1 соответствует полностью упорядоченной

кристаллической структуре, значение +0.5 – аморфному телу. Промежуточные значения дают эффективную меру упорядоченности соединения в целом. Зависимость $\nu(P)$ определяет изменение температурной зависимости (а значит, и упорядоченности) соединения от давления. Как правило, абсолютное значение коэффициента n уменьшается, и таким образом $\nu(P)$ имеет положительный знак и не превышает единицы (для большинства рассмотренных соединений <<1) на всем диапазоне (в нашем случае установка позволяла проводить исследования до 400 МПа). Зависимость $\delta_{T_0}(P)$ вместе со значением при нулевом давлении $\lambda(T_0,0)$ полностью определяют барическую зависимость теплопроводности при заданной температуре T_0.

Значения $\nu(P)$ и $\delta_{T_0}(P)$ (для двух выбранных опорных температур) для мергеля, песчаника и гранита представлены на рисунке 2.1.



a b c

Рисунок 2.1. Зависимости $\nu(P)$ (a) $\delta_{T_0=273K}(P)$(b) $\delta_{T_0=473K}(P)$ (c) и для: (1) гранита ($n_0=-0.72$); (2) песчаника ($n_0=-0.32$) и (3) мергеля ($n_0=0.368$).

Во всех представленных материалах наблюдается существенное ослабление температурной зависимости с давлением, характеризуемое функцией $\nu(P)$. Вместе с тем наблюдался рост теплопроводности с давлением, характеризуемый $\delta_{T_0}(P)$. Если произведение $n_0 \cdot \nu(P)$ близко к нулю на всём барическом диапазоне (даже при ненулевом n_0) зависимость функции $\delta_{T_0}(P)$ от выбора температуры T_0 уменьшается (см. рис. 2.1 (b,c)).

Как видно из рисунка 2.1, зависимости $\nu(P)$ и $\delta_{T_0}(P)$ для исследованных образцов достаточно сильно коррелированны между собой. Более того, возможен выбор температуры T_0 , при которой обе зависимости могут быть с достаточно хорошей точностью описаны сходными малопараметрическими эмпирическими выражениями.

ВЫВОДЫ

Таким образом, на примере образцов гранита, песчаника и мергеля исследована температурно-барическая зависимость теплопроводности горных пород как природных композитных материалов. Установлено, что рост давления, как правило, приводит к снижению температурной зависимости теплопроводности, и к некоторому росту теплопроводности.

Предложено малопараметрическое описание зависимости с выделением одной температурной и двух барических компонент, одна из которых описывает поведения степенного коэффициента температурной зависимости, другая – изотермическую барическую зависимость. Установлена корреляция между барическими компонентами.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КВАЗИПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЛАЗЕРНЫХ УДАРНЫХ ВОЛН

Эксперимент реализовывался на лазерной установке PALS (Prague Asterix Laser System) [21]. Использовался одноканальный йодный лазер с длиной волны излучения 0,438 мкм на третьей гармонике. Максимальная энергия в импульсе составляла 400 Дж на поверхности мишени, длительность импульса по полувысоте интенсивности – 400 пс.

ЭОК регистрировала оптическое свечение тыльной стороны мишени. Для отсечения электромагнитного излучения третьей гармоники основного лазера перед ЭОК был установлен красный фильтр RG60. Расположенная в плоскости мишени рентгеновская электронно-оптическая полосовая камера позволяла также получать изображения процесса распространения фронта рентгеновского излучения по толщине мишени. Использовались двухслойные мишени (малоплотная пена различной плотности и состава (50 мкм) + алюминиевая фольга (10 мкм)), а также (для сравнения) простые однослойные (10 мкм) алюминиевые мишени. Луч основного лазера делился призмой на две приблизительно равных части, которые фокусировались на мишени в виде двух фокальных пятен, диаметр каждого из которых составлял около 30 мкм. Расстояние между центрами пятен составляло около 100 мкм. Таким образом, создавалась сильная неоднородность, которую априори очень трудно сгладить.

В целом система характеризовалась хорошей стабильностью параметров лазерного излучения от выстрела к выстрелу, а также достаточно однородным пространственным распределением интенсивности по каждому из двух фокальных пятен, создававших близкие квазипараллельные ударные волны.

Моделирование лазерного ударного сжатия было выполнено с использованием радиационного кода MULTI [22] в 1D и 2D, с многогрупповым переносом излучения, связанным с лагранжевой гидродинамикой, на основе полностью неявной численной схемы. Мы приняли условия локального термодинамического равновесия Уравнения состояния были взяты из SESAME [23] или рассчитаны MPQEOS [24].

Пространственно-временные экспериментальные изображения собственного свечения тыльной стороны мишени, полученные с помощью ЭОК, приведены на рис. 3.1. Опорный сигнал в верхней левой части изображения отражает временную развертку лазерного импульса на фронтальной стороне мишени. Опорный сигнал устанавливался и испытан на серии калибровочных выстрелов без мишени и отводился с использованием оптического волокна. Однако на ЭОК снимках для уменьшения энергии основного

лазерного луча в разных выстрелах (включая калибровочные) использовался набор фильтров. Таким образом, для дальнейшей обработки данных вводилась калибровочная поправка, своя для каждого выстрела (180 пс для всех выстрелов с энергией ~50 Дж).

Мы видим, что размер ударного пробоя для композитных мишеней больше, чем размер, наблюдаемый для мишеней из чистого алюминия, и в то же время достижения ударной волной тыльной стороны задерживается.

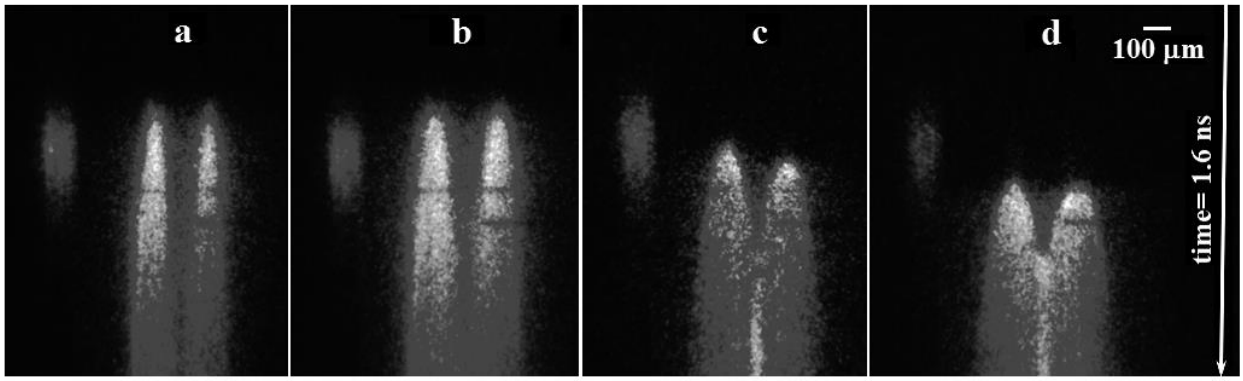


Рисунок 3.1. Разрешенные по времени ЭОК изображения собственного излучения тыльной стороны мишени: а) выстрел № 30142, E≅50 Дж, однослойная алюминиевая мишень; б) выстрел № 30141, E≅115 J, однослойная алюминиевая мишень в) выстрел № 30147, E≅50 Дж, композитная мишень: Al + пена 50 мг/см^3; г) выстрел № 30148, E≅115 Дж, композитная мишень: Al + пена 50 мг/см^3.

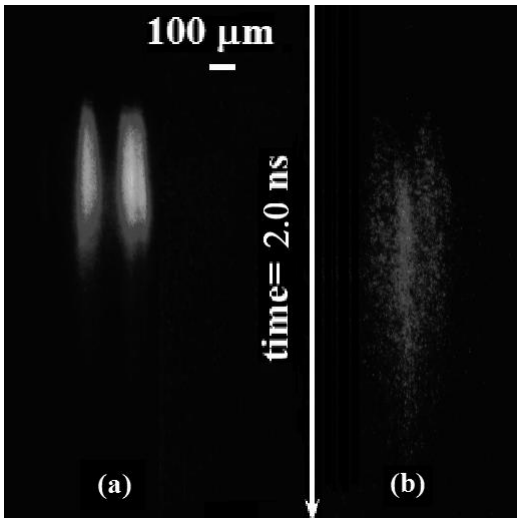


Рисунок 3.2. Разрешенные по времени рентгеновские для: а) выстрела №30151, E≅50 Дж, композитная мишень: Al + пена 50 мг/ см^3 со встроенными наночастицами Au; б) выстрел 30147, композитная мишень: E ≅ 50 Дж, Al + пена 50 мг/см^3.

На рис. 3.2 показаны рентгеновские снимки для двух снимков. Рентгеновская полосовая камера, соединенная с точечным отверстием для пространственного разрешения, смотрела на переднюю сторону цели почти под углом 90 ° относительно хода лазерного луча.

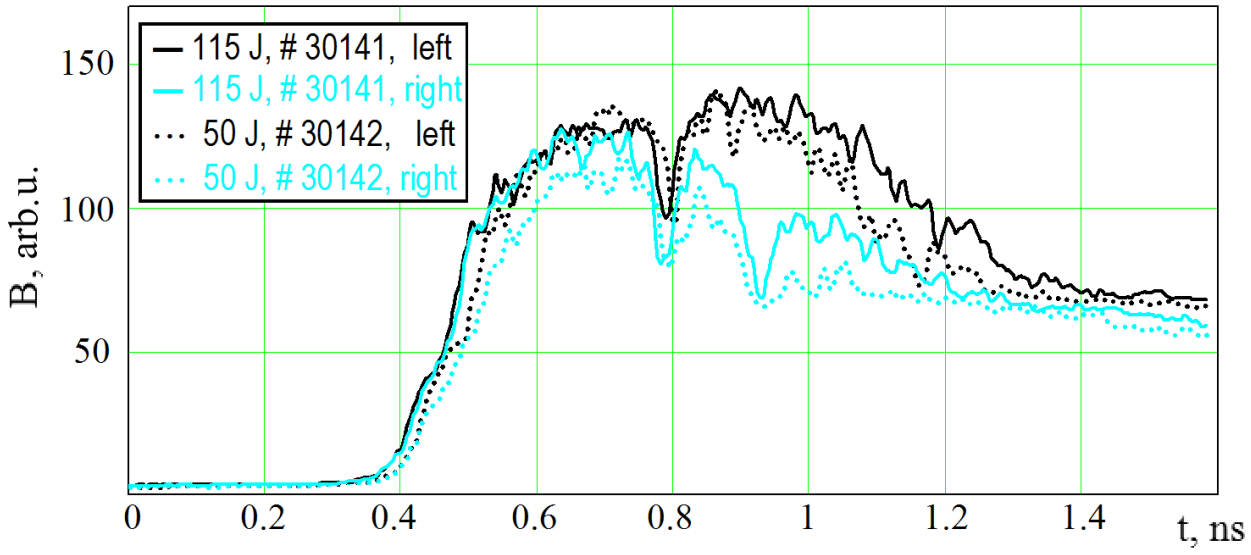
Экспериментальные данные сравнивались с численным 1D моделированием, выполненным с использованием кода MULTI (здесь мы просто смоделировали одно фокусное пятно, чтобы воспроизвести единственный ударный пробой). Была обнаружена существенная разница с экспериментом, поскольку для воспроизведения экспериментального времени пробоя нужно было использовать интенсивность 0,55–0,75 10^{15} Вт/см^2 вместо реальной интенсивности на мишени 1,3–3 10^{15} Вт/см^2. Такое несоответствие наблюдалось в предыдущих экспериментах и объяснялось, главным образом, следствием предварительного нагрева, вызванного горячими электронами, образующимися при таких больших интенсивностях лазера [25]. Предварительный нагрев приводит к значительному расширению задней стороны мишени, что, в свою очередь, приводит к отсроченному прорыву и заметному снижению скорости удара. Достаточно хорошее воспроизведение было достигнуто моделированием с использованием кода CHIC с самосогласованным учетом генерации горячих электронов вследствие параметрической нестабильности, их распространение в мишени, поглощение энергии и последующее воздействие на гидродинамику [25]. Здесь мы не следовали такому, потому что мы не пытались воспроизвести все детали экспериментальных результатов, а скорее изучали относительные изменения, возникающие при изменении параметров лазера или мишени.

Экспериментальные результаты также показали, что при наличии первого абляционного малоплотного слоя время достижения ударной волны тыльной стороны мишени может увеличиваться, а не уменьшается при увеличении энергии импульса (см. рис. 3.3) Вероятно, этот эффект также связан с предварительным нагревом мишени горячими электронами, но его анализ требует дальнейшей работы. Следует отметить, что впервые эффект был доложен в наших работах [26,27]

Другим наблюдаемым эффектом является появление яркой области между двумя фокусными пятнами на разрешенных по времени рентгеновских снимках (см. рис. 3.2 b).

Чтобы качественно объяснить это явление, мы использовали двумерное моделирование. Для моделирования эксперимента с двумерным кодом необходимо было принять осевую симметрию. Поэтому каждое фокусное пятно моделировалось концентрическими кольцами. Результаты этих 2D-симуляций для простых и многослойных целей представлены на рис. 3.4.

Мишень из алюминиевой фольги



Комплексная мишень (плотность пены 50 мг/см^3)

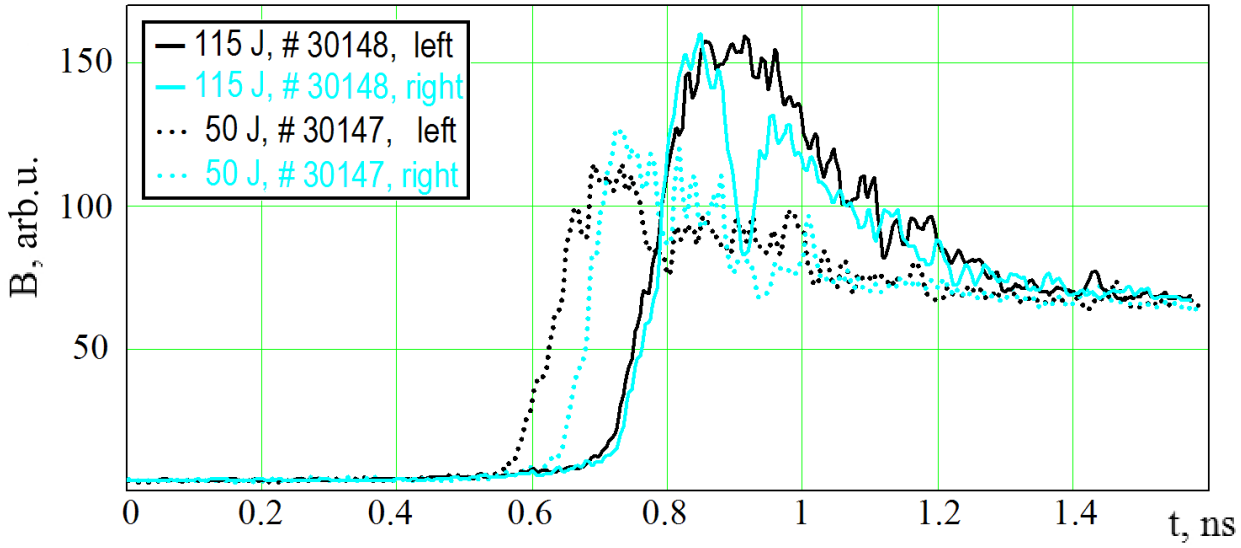


Рисунок 3.3. Пространственно интегрированные временные зависимости самоизлучения на задней стороне (B, произвольные единицы): для левого (черного) и правого (лазурного) пятен (для каждого изображения на рис. 1. Время для всех снимков синхронизируется с помощью соответствующий проверочный и с учетом поправки для различной толщины используемых фильтров или разных энергий лазера (около 30 пс). Нулевая точка соответствует верхней точке выстрела № 30147.

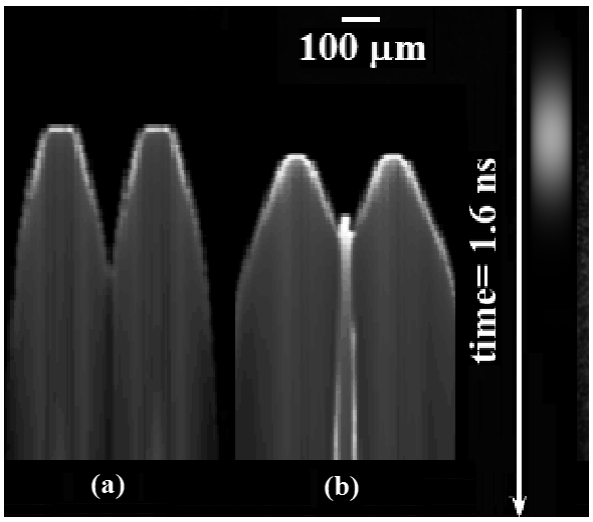


Рисунок 3.4. Температура задней стороны, полученная в 2D MULTI-моделировании для: (а) мишень Al 10 мкм; б) композитная мишень с 10 мкм Al + пена 50 мг/см^3 пены. Лазерный импульс с гауссовым временным профилем, длительностью 300 пс (FWHM), длиной волны 0,44 мкм и интенсивностью 5,5 10^{14} Вт/см^2 (соответствует интенсивности лазера для времени пробоя для выстрела № 30142, мишень из чистого алюминия, полная энергия 50 Дж). Искусственный опорный сигнал, соответствующий профилю лазера на фронтальной стороне, показан справа.

Поскольку плотность алюминия существенно превосходит плотность пены, от поверхности раздела пена-металл распространяется две ударных волны: прямая – в алюминиевую фольгу, и отраженная – обратно в пену [28]. В зеркальном приближении (справедливом для относительно слабых ударных волн), и считая, что ударная волна успевает войти в стационарный режим при достижении границы раздела, давление в алюминии можно рассчитать как [29]:

$$P_{\mathrm{Al}} = \frac{4\rho_{\mathrm{Al}}^{0}(\gamma_{\mathrm{Al}}+1)}{\left(\sqrt{\gamma_{\mathrm{foam}}+1}\sqrt{\rho_{\mathrm{foam}}}+\sqrt{\gamma_{\mathrm{Al}}+1}\sqrt{\rho_{\mathrm{Al}}^{0}}\right)^{2}} P_{abl} \quad . \qquad (3.1)$$

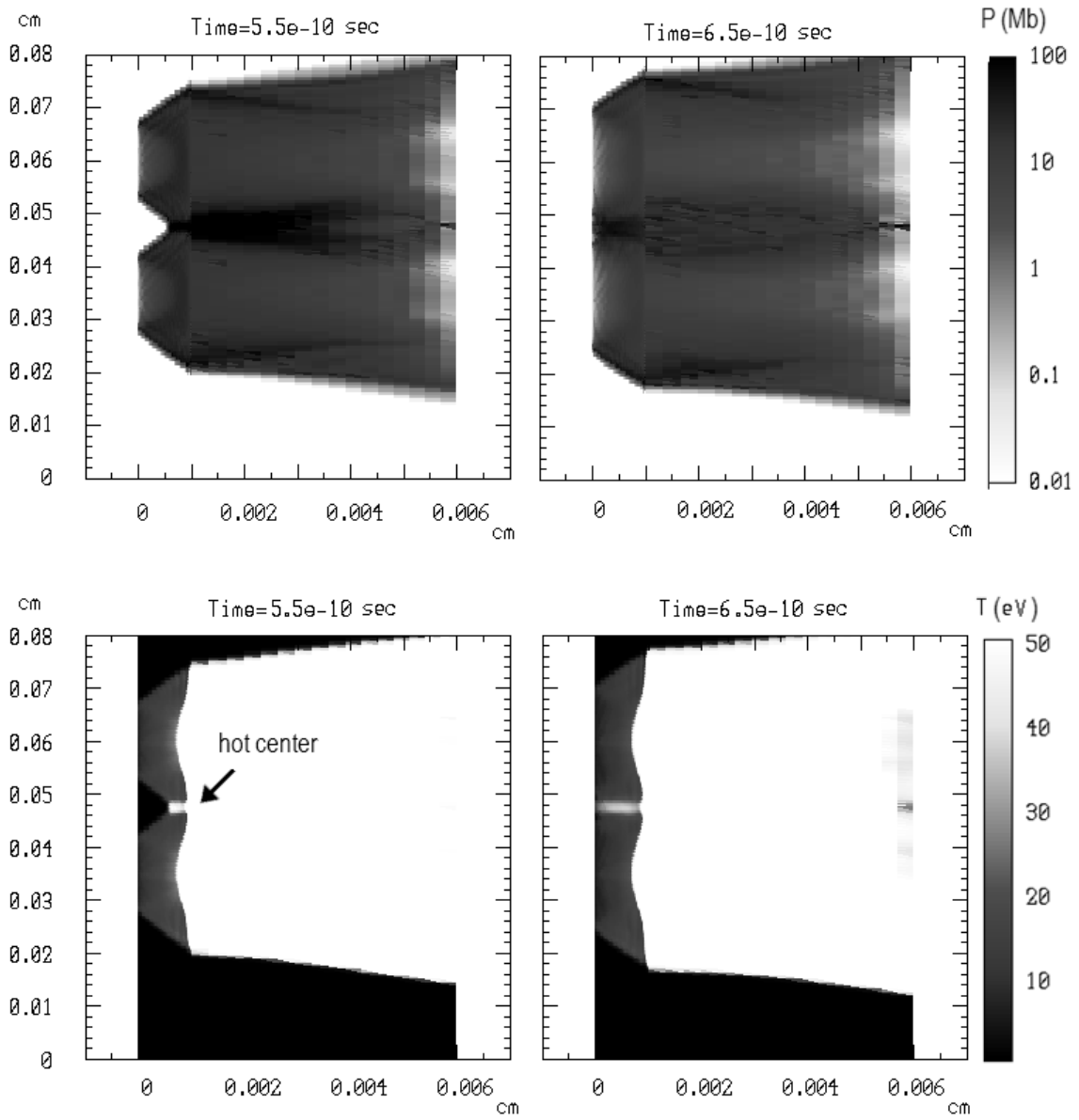
Здесь ρ_{Al}^{0} и ρ_{foam}^{0} - начальные плотности алюминия и пены соответственно, а абляционное давление может быть оценено как:

$$P_{abl} \approx 8.6\left(I/10^{14}\right)^{2/3}\lambda^{-2/3}\left(A/2Z\right)^{1/3} \quad . \qquad (3.2)$$

где I – интенсивность лазера на мишени в Вт/см^2, λ – длина волны лазера в мкм, а A, Z и Z* – массовое число, атомный номер и эффективная степень ионизации мишени.

Считая $\gamma_{\mathrm{Al}}= \gamma_{\mathrm{foam}}$, уравнение (3.1) упрощается:

$$P_{\mathrm{Al}} = \frac{4\rho_{\mathrm{Al}}^{0} P_{abl}}{\left(\sqrt{\rho_{\mathrm{foam}}} + \sqrt{\rho_{\mathrm{Al}}^{0}}\right)^{2}} \quad . \tag{3.3}$$



(a) **(b)**

Рисунок 3.5. Пространственные профили давления (верх) и температуры (ни3) для *t*=0,55 нс (а) и 0,65 нс. Фокусное пятно представляло собой два плоских концентрических кольца (ширина 100 мкм, расстояние 150 мкм) с гауссовым временным профилем и длительностью импульса 300 пс (FWHM), длиной волны 0,44 мкм и интенсивностью 5,5 10^{14} Вт/см^2 для композитной мишени: Al + пена 50 мг/см^3.

Абляционное давление для различных материалов в нашем случае варьируется в пределах нескольких процентов. Таким образом, давление в алюминиевой фольге при наличии первого пенного слоя увеличивается примерно в 3,7 раз. Более точное 2D моделирование дает фактор около 3, что можно считать хорошим соответствием простой одномерной модели.

Далее столкновение отраженных ударных волн создает область высокого давления в центре, а это, в свою очередь, не позволяет упасть давлению в соответствующей части алюминиевого слоя (см. рис. 3.5).

Интересно также сравнить динамику ударов, вызванных «двойным пятном» (той же геометрии, размера и интенсивности лазера), когда газовая струя помещается перед алюминиевой мишенью [20]. В случае газовой струи газовый слой до Al был подкритическим, и лазерный луч сглаживался при распространении через него под действием ионизационных эффектов. Поэтому наблюдается слияние двух лазерных пятен при достижении фронтальной поверхности алюминия без дополнительного перераспределения давления.

ВЫВОДЫ

Таким образом, наши результаты указывают на значительную задержку в достижении ударной волной тыльной стороны мишени. Более того, время достижения ударной волной тыльной стороны может увеличиваться с увеличением энергии лазерного импульса.

Нами также были обнаружены столкновения между двумя квазипараллельными ударными волнами, вызванными каждым фокусным пятном, приводящие к существенному перераспределению термодинамических параметров и создавая большие и долгоживущие давления в области столкновения. Такая кумуляция давления и перераспределение могут быть интересны для приложений в физике высокой плотности энергии.

4. РАЗРАБОТКА ТРЕХФАЗНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОСТОГО ВЕЩЕСТВА ОГРАНИЧЕННОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ГИББСА

Как было показано экспериментально [31] и путем численного моделирования [32], при уменьшении размера наночастицы (нанокристалла или нанокапли) со свободной поверхностью параметры фазового перехода кристалл-жидкость (ФП К-Ж) в ней изменяются. При уменьшении числа атомов (N) в наночастице уменьшаются как температура плавления (T_m), так и температура начала кристаллизации ($T_N < T_m$), уменьшается скачок удельной (на атом) энтропии (Δs) и удельная скрытая теплота ФП К-Ж ($\Delta h = T_m \Delta s$). Причем если экстраполировать эти размерные зависимости на малые значение N, то при некотором значении числа атомов (N_0) обе эти функции становятся равными нулю: $\Delta s(N_0) = 0$ и $\Delta h(N_0) = 0$, а зависимости $T_m(N)$ и $T_N(N)$ пересекаются: $T_m(N_0) = T_N(N_0) > 0$ К. Как было показано в [33], в наночастице из N_0 атомов исчезает скачок удельного объема ФП К-Ж: $\Delta v(N_0) = 0$, и достигается равенство удельных (на единицу площади) поверхностных энергий твердой и жидкой фаз: $\Delta\sigma = \sigma(s) - \sigma(l) = 0$. Таким образом, при $N \leq N_0$ различие фаз исчезает и ФП К-Ж здесь уже невозможен, ибо для такого кластера термодинамическое понятие фазы уже не применимо. Для металлов в [33] была получена оценка: $N_0 = 50 - 300$.

Но данное утверждение об исчезновении ФП К-Ж при $N \leq N_0$ было сделано нами в [33] на основании экстраполяции размерных зависимостей, которая неоднозначна и не объясняет физических причин исчезновения ФП К-Ж. В связи с этим до сих пор в некоторых статьях на основании определенных критериев теоретически изучают ФП К-Ж в наночастицах аргона из 13 и даже из меньшего числа атомов. Поэтому целью работы являлось изучение исчезновения ФП К-Ж при уменьшении числа атомов на основании статистической модели простого однокомпонентного вещества ограниченной определенной поверхностью.

Создать аналитическую модель поверхности очень сложная и до сих пор не решенная задача. Сложность в том, что на поверхности имеется большой градиент плотности, в результате чего атомы на поверхности находятся в динамическом равновесии с обеими фазами, которые и образуют поверхность. Более того, если считать вещество в поверхностном слое как иную фазу (отличную от «объемной»), то возникают вопросы, как о толщине поверхностного слоя, так и об изменении термодинамических свойств вещества в этом слое при переходе от одной фазы в другую.

Чтобы обойти эти проблемы Дж.В. Гиббс (J.W. Gibbs) вместо реальной межфазной границы ввел *разделяющую поверхность* (dividing surface) [34, стр. 220; 5, гл. 15, стр. 563; 36, гл. 19, стр. 822], к которой относятся поверхностные характеристики. Если реальная поверхность представляет собой переходную зону и имеет некоторую толщину, то разделяющая поверхность это чисто геометрическая поверхность, которая толщины не имеет. Такую виртуальную поверхность называют поверхностью Гиббса и все рассчитанные для такой модели поверхностные характеристики относятся к гладкой геометрической поверхности не имеющей толщины. Мы будем полагать, что наша модель ограничена поверхностью Гиббса, а для изучения образования S-петли на изотерме уравнения состояния, которая описывает ФП К-Ж используем трехфазную модель простого однокомпонентного вещества, формализм которой представлен в работах [37-39].

ТРЕХФАЗНАЯ МОДЕЛЬ ПРОСТОГО ВЕЩЕСТВА

Будем полагать, что рассматриваемая система образует решеточную структуру из $N + N_v$ сферических ячеек одинакового объема, из которых N_v ячеек вакантны, а N ячеек заняты тождественными сферически симметричными атомами, масса каждого из которых равна m. Из N атомов только часть атомов ($N - N_d$) локализована в ячейках, а другая часть (N_d) – делокализована, т.е. они могут перемещаться по всему объему. Причем со временем локализованный атом, возбудившись, может стать делокализованным, и наоборот.

Пусть атомы взаимодействуют посредством потенциала Ми-Леннард-Джонса [36, 37]:

$$\varphi(r) = \frac{D}{(b-a)}\left[a\left(\frac{r_o}{r}\right)^b - b\left(\frac{r_o}{r}\right)^a\right] \quad , \tag{4.1}$$

где D и r_o – глубина и координата минимума потенциала, $b > a > 1$ – параметры.

Если в решетке содержится N_v вакансий, однородно распределенных по объему, то первое координационное число (т.е. число ближайших соседних атомов) равно:

$$k_n = \frac{k_n^o N}{N + N_v} = k_n^o \cdot (1 - \phi_v)\,, \tag{4.2}$$

где k_n^o – число ближайших к данному атому ячеек (как занятых, так и вакантных), т.е. это первое координационное число при $N_v = 0$, ϕ_v – вероятность образования вакансии в решетке простого вещества [37, 40]:

$$\phi_v = \frac{N_v}{N + N_v} = \frac{2}{\pi^{1/2}} \int\limits_{[E_v/(k_B T)]^{1/2}}^{\infty} \exp(-t^2)\cdot \mathrm{d}\,t \quad , \tag{4.3}$$

где k_B – постоянная Больцмана, E_v – энергия создания вакантного узла в решетке.

Объем системы равен сумме объемов, приходящихся на одну (занятую либо вакантную) ячейку (v_a), форму которой считаем сферической:

$$V = \frac{\pi}{6k_p}(N + N_v)c^3 = \frac{v_a}{k_p}\frac{N}{(1-\phi_v)}, \qquad v_a = \frac{\pi}{6}c^3 = \frac{V}{N}k_p(1-\phi_v), \tag{4.4}$$

$$c_o = \left(\frac{6k_pV}{\pi N}\right)^{1/3} = \left[\frac{6v_a(\phi_v = 0)}{\pi}\right]^{1/3}, \tag{4.5}$$

где $c = c_o\cdot(1 - \phi_v)^{1/3}$ – расстояние между центрами ближайших ячеек, k_p – коэффициент упаковки структуры из ($N + N_v$) сферических ячеек, c_o – расстояние между центрами ближайших ячеек в исходной (не срелаксировавшей в активированное вакансиями состояние) безвакансионной (при $N_v = 0$) системе (на это указывает индекс "о").

Учтя, что центр делокализованного атома может перемещаться по всему объему системы, а центр локализованного атома только в пределах ячейки, в которой он локализован, для удельной (на атом) свободной энергии Гельмгольца макроскопической системы (где $N \to \infty$ и $V \to \infty$ при N/V = const) было получено выражение [37-39]:

$$f_H = f_i + f_s + f_w + f_d + f_k. \tag{4.6}$$

Здесь f_i – это удельная свободная энергия трансляционного движения делокализованных атомов:

$$f_i = -x_d k_B T\left[\left(\frac{T}{A_d}\right)^{3/2}\frac{V}{V_0}\right], \tag{4.7}$$

где введены обозначения:

$$A_d = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m\,k_B}\right)\left(\frac{N}{\mathrm{e}\,V_0}\right)^{2/3}, \qquad V_0 = N\left(\frac{\pi}{6k_p}\right)r_o^3 . \tag{4.8}$$

Здесь $\hbar$ – постоянная Планка, e = 2.718 – основание натурального логарифма, x_d – доля делокализованных атомов, т.е. это вероятность атома иметь кинетическую энергию выше, чем E_d – энергии делокализации атома [37, 41]:

$$x_d = \frac{N_d}{N} = \frac{2}{\pi^{1/2}}\int_{E_d/(k_BT)}^{\infty} t^{1/2}\exp(-t)\cdot \mathrm{d}\,t . \tag{4.9}$$

Второе слагаемое в (4.6) – это удельная свободная энергия статического взаимодействия всех атомов между собой, которая при использовании приближения «взаимодействия только ближайших соседей» имеет вид:

$$f_s = \left(\frac{k_n^o}{2}\right)(1-\phi_v)D\cdot U_o(R) , \tag{4.10}$$

где $R = r_o/c$ – относительная линейная плотность системы,

$$U_o(R) = \frac{1}{(b-a)}\left(aR^b - bR^a\right), \qquad R = \frac{r_o}{c} = \left[\frac{V_0}{V(1-\phi_v)}\right]^{1/3} .$$

Третье слагаемое в (4.6) – это удельная свободная энергия колебательного движения локализованных атомов по модели кристалла Эйнштейна (Θ_E – температура Эйнштейна):

$$f_w = 3(1-x_d)k_BT\left\{0.5\frac{\Theta_E}{T} + \ln\left[1-\exp\left(-\frac{\Theta_E}{T}\right)\right]\right\} . \tag{4.11}$$

Функция f_d – это удельная свободная энергия динамического взаимодействия делокализованных атомов из-за их смещения от центров ячеек при миграции по объему. В приближении «взаимодействия только ближайших соседей» для этой функции в работах [37, стр. 21; 8; 42, стр. 243] было получено выражение:

$$f_d = \frac{x_d k_n^o (1-\phi_v)abD}{2(b-a)}\left\{R^b\left[\frac{l_3(b,\xi_p)}{b}\right] - R^a\left[\frac{l_3(a,\xi_p)}{a}\right]\right\}, \tag{4.12}$$

где введены обозначения:

$$l_3(k,t) = \frac{(1+t)^{k-2} - (1-t)^{k-2}}{2(k-2)t(1-t^2)^{k-2}} - 1, \qquad \xi_p = \frac{0.5}{3^{1/2}k_p^{\ 1/3}} < 0.5 . \tag{4.13}$$

Последнее слагаемое в (4.6) f_k – это удельная свободная энергия «перестановочного движения» атомов, которая возникает из-за применения формулы Стирлинга, и которое исчезает в «термодинамическом пределе», т.е. при $N \to \infty$, $V \to \infty$ и $v = V/N = \text{const}$ [37]:

$$f_k = -\frac{k_BT}{N}\ln\left[\frac{(N_d/\mathrm{e})^{N_d}}{N_d!}\right] \cong \frac{k_BT}{2N}\ln(2\pi N_d) . \tag{4.14}$$

Входящие в (4.2)-(4.12) функции E_v, E_d и Θ_E были определены для макросистемы простого вещества в работах [37-41, 43]. Энергия создания вакансии в структуре имеет вид [37, 40]:

$$E_v = \frac{E_L}{1 + x_d[(C_D E_L / k_BT) - 1]} , \tag{4.15}$$

где введены обозначения:

$$E_L = \frac{m}{k_n^o}\left(\frac{c_o k_B \Theta_{Eo}}{2\hbar}\right)^2 \cdot f_y\left(\frac{\Theta_{Eo}}{T}\right), \qquad C_D = \frac{4k_n^o}{3k_p^{\ 2/3}} , \qquad f_y(y_w) = \frac{2}{y_w}\frac{[1-\exp(-y_w)]}{[1+\exp(-y_w)]} . \tag{4.16}$$

Индекс «о» у функций c_o и Θ_{Eo} означает, что функции рассчитаны для исходной (не срелаксировавшей в активированное вакансиями состояние) безвакансионной

виртуальной решетки (т.е. при $\phi_v = 0$).

Для энергии делокализации атома было получено выражение [37, 39, 41]:

$$E_d = \left(\frac{3}{8\pi^2}\right) \cdot m \cdot \left(\frac{c_o k_B \Theta_{Eo}}{\hbar\, k_p^{\,1/3}}\right)^2 \cdot f_y(y_{wo}) = E_{d1} \cdot f_y(y_{wo}) = C_{ld} \cdot E_L\,, \tag{4.17}$$

где введены обозначения:

$$C_{ld} = \frac{3k_n^o}{2\pi^2 k_p^{\,2/3}} = \left(\frac{9}{8\pi^2}\right) C_D\ , \qquad E_{d1} = E_d(f_y(y_{wo}) = 1) = \frac{3m}{8k_p^{\,2/3}}\left(\frac{3c_o k_B \Theta_o}{4\pi\hbar}\right)^2. \tag{4.18}$$

Здесь Θ – температуры Дебая, которая связана с температурой Эйнштейна соотношением: $\Theta = (4/3)\Theta_E$ [42, стр. 796; 44, гл. 2, стр. 116]. Для функции Θ было получено выражение следующего вида [37, 43]:

$$\Theta = A_w \xi \left[-1 + \left(1 + \frac{8D}{k_B A_w \xi^2}\right)^{1/2}\right], \tag{4.19}$$

где введены следующие обозначения:

$$\xi = \frac{9}{k_n^{\,o}}\ , \qquad A_w = K_R \frac{5k_n ab(b+1)}{144(b-a)}\left(\frac{r_o}{c}\right)^{b+2}, \qquad K_R = \frac{\hbar^2}{k_B r_o^{\,2} m}\,. \tag{4.20}$$

Было показано, что данные определения функций E_v, E_d и Θ_E позволяют получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными оценками. Кроме этого, использование входящих в (4.6) функций E_v, E_d и Θ_E в виде (4.15)-(4.20) приводит к выполнимости как третьего начала термодинамики в «сильной» формулировке Планка, так и к согласованности термического и калорического уравнений состояния для макросистемы. Было показано, что данный формализм полностью учитывает «коллективную энтропию» (communal entropy) [37; 42, стр. 227; 45; 46]. «Коллективная энтропия» определяет собой ту поправку, которую необходимо было включать в «твердоподобные» или в «газоподобные» теории жидкого состояния из-за некорректного учета в них как разницы в областях доступности у локализованных и делокализованных атомов, так и для корректного учета числа возможных перестановок в системе. В соответствии с (4.14) «параметр коллективной энтропии» равен [37, стр. 52]: $\sigma_{com} = \exp[x_d(v, T)]$. Отсюда при $x_d = 1$ (т.е. для газа при высоких T) получаем: $\sigma_{com} = e$, а при $x_d = 0$ (т.е. для кристалла при низких T) имеем: $\sigma_{com} = 1$.

РАСЧЕТ ИЗОТЕРМ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ МАКРОСИСТЕМЫ

Для расчетов был взят аргон (m(Ar) = 39.95 a.m.u.), имеющий в твердой фазе гранецентрированную кубическую (ГЦК) структуру: k_n^o = 12, k_p = 0.7405. Тогда структурные параметры решеточной модели будут равны:

$$C_D = 4k_n^o/(3k_p^{2/3}) = 19.548 \text{ из } (4.16),$$

$$C_{ld} = 3k_n^o/(2\pi^2 k_p^{2/3}) = 2.2282 \text{ из } (4.18),$$

$$\xi = 9/k_n^o = 0.75 \text{ из } (4.20).$$

Параметры межатомного потенциала Ми-Леннард-Джонса (4.1) для Ar были определены самосогласованным образом в [37] из экспериментальных данных для твердой фазы:

$$r_o = 3.7555\times10^{-10}\,\text{m}, \qquad D/k_B = 173.6\ \text{K}, \qquad a = 6, \qquad b = 17.$$

Тогда входящие в формализм термодинамические константы модели будут равны:

$$v_o = (\pi/6\, k_p)\, r_o^3 = 37.4522\times10^{-30}\,\text{m}^3, \quad V_o = v_o\, N_A = 22.5542\ \text{cm}^3/\text{mol},$$

$$\Theta_E(1) = 65.106\ \text{K}, \quad \Theta(1) = (4/3)\,\Theta_E(1) = 86.807\ \text{K}, \quad \gamma(1) = 3.011.$$

Здесь N_A – число Авогадро (Avogadro constant), $\gamma = -(\partial\ln\Theta/\partial\ln v)_T$ – первый параметр Грюнайзена. Значение 1 у функций A_w, Θ_E и γ указывает на то, что они определены при аргументе равном: $R = r_o/c = 1$.

Расчет термического уравнения состояния проводился численным дифференцированием изотермической зависимости функции f_H/D по аргументу $v/v_o = (c_o/r_o)^3$:

$$\frac{Pv_o}{D} = -\left[\frac{\partial(f_H/D)}{\partial(v/v_o)}\right]_T.$$

Здесь $v = V/N = (\pi/6k_p)\, c_o^3$ – удельный (на атом) объем системы при расстоянии между центрами ближайших атомов равном c_o.

Расчет зависимости функции Pv_o/D от аргумента v/v_o показал, что при средних температурах изотермы имеют две S-петли, соответствующие по физическому смыслу ФП К-Ж и Ж-Г, как это показано на рис. 1 и 2. Однако рассчитанные параметры ФП К-Ж заметно отличаются от экспериментальных параметров плавления аргона из работ [45, 47-49]. На рис. 4.1 бинодали ФП К-Ж показаны кубиками – для кристалла, и кружками – для жидкой фазы.

Расчеты показали, что при высоких температурах S-петля ФП Ж-Г стягивается в критическую точку (на рис. 4.2 она показана кружком), имеющую следующие параметры:

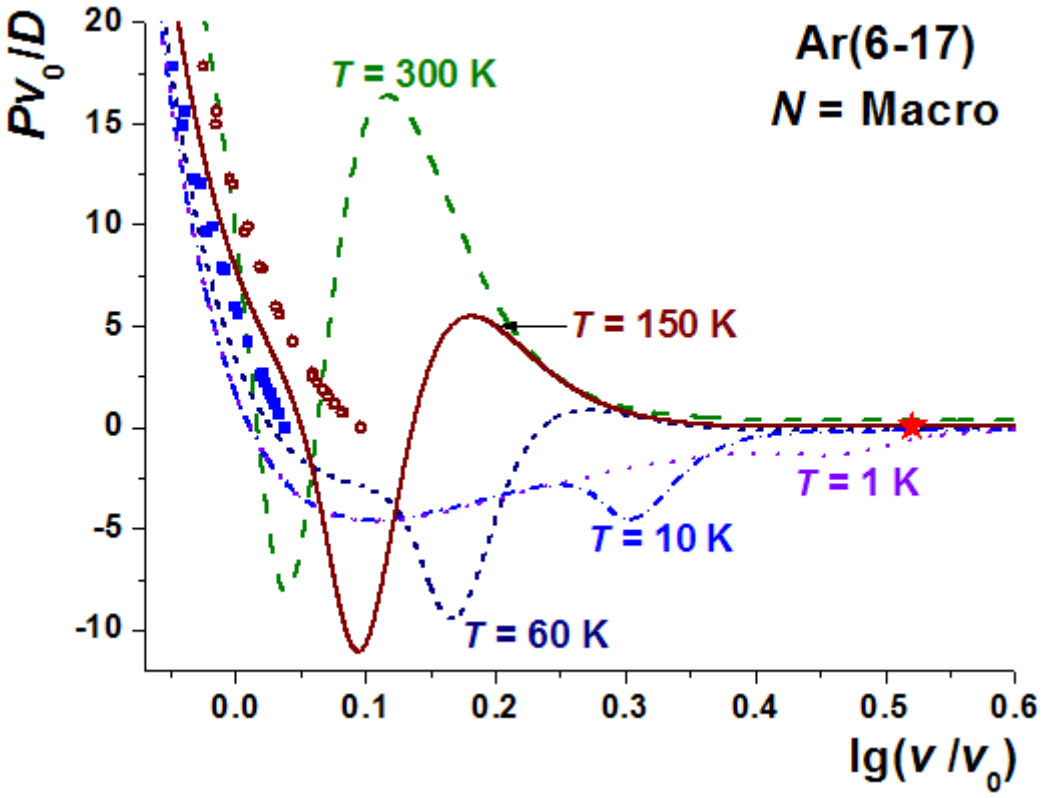


Рисунок 4.1. Изотермы уравнения состояния аргона. Символами показаны экспериментальные бинодали ФП К-Ж из работ [45, 47-49]: для кристалла сплошными кубиками, для жидкой фазы полыми кружками. Положение экспериментальной критической точки для ФП жидкость-газ из [50] показано звездочкой.

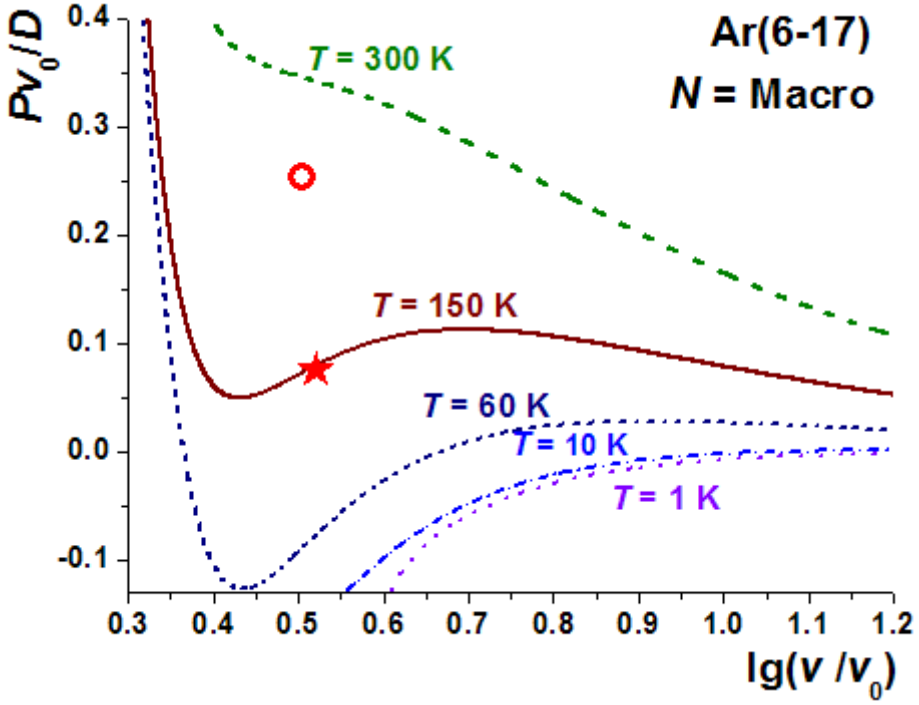


Рисунок 4.2. Изотермы уравнения состояния аргона в области критической точки ФП Ж-Г. Положение экспериментальной критической точки из [50] показано звездочкой, а расчетное значение – кружком.

$$T_{cr} = 249\ \text{K},\quad V_{cr} = 71.98\ \text{cm}^3/\text{mol},\quad P_{cr} = 0.016215\ \text{GPa},\quad Z_{cr} = [P\,v/(k_B\,T)]_{cr} = 0.564,$$
$$\lg(v_{cr}\,/\,v_o) = 0.504,\quad v_{cr}\,/\,v_o = 3.1915,\quad P_{cr}\,v_o\,/\,D = 0.2534,$$
$$\phi_{v\,cr} = 0.750138,\quad k_{n\,cr} = 2.99835,\quad x_{d\,cr} = 0.998754.$$

Эти значения существенно отличаются от экспериментальных параметров критической точки аргона, которые равны (звездочка на Рис. 4.1 и 4.2) [50]:

$$T_{cr} = 150.9\ \text{K},\quad V_{cr} = 74.6\ \text{cm}^3/\text{mol},\quad P_{cr} = 0.004777\ \text{GPa},\quad Z_{cr} = 0.290,$$
$$\lg(v_{cr}\,/\,v_o) = 0.520,\quad v_{cr}\,/\,v_o = 3.3076,\quad P_{cr}\,v_o\,/\,D = 0.0762.$$

Хотя имеются и другие данные из справочника [51]:

$$T_{cr} = 150.8\ \text{K},\quad V_{cr} = 74.9\ \text{cm}^3/\text{mol},\quad P_{cr} = 0.004747\ \text{GPa},\quad Z_{cr} = 0.291,$$
$$\lg(v_{cr}\,/\,v_o) = 0.521,\quad v_{cr}\,/\,v_o = 3.321,\quad P_{cr}\,v_o\,/\,D = 0.0762$$

Экспериментальное значение первого координационного числа в критической точке аргона равно: $k_{n\,cr}$ = 4.8 – 5.6 [52], 3.6 ± 0.1 = 3.5 – 3.7 [53], 3.7 ± 0.5 = 3.2 – 4.2 [54]. Отсюда, согласно (3), вероятность образования вакантного узла в ГЦК виртуальной решетке аргона в критической точке должна быть равной: $\phi_v = 1 - (k_n/k_n^o) = 1 - (k_n/12)$, т.е.: $\phi_{v\,cr}$ = 0.6 – 0.533 [52], 0.7 ± 0.0083 [53], 0.6917 ± 0.0417 [54]. Это достаточно близко к полученным нами величинам $\phi_{v\,cr}$ и $k_{n\,cr}$.

При низких температурах две S-петли ФП К-Ж и Ж-Г сливаются в одну большую S-петлю, соответствующую ФП кристалл-газ. На Рис. 4. 1 видно, что на изотермах T = 10 и 1 К S-петли ФП Ж-Г уже нет.

Таким образом, модель позволяет с единых позиций получить качественную картину для всех трех фаз простого вещества. При этом в модели не содержится никаких «внешних критериев» для запуска ФП К-Ж, и никаких подгоночных постоянных. Но количественные результаты еще далеки от экспериментальных данных. Вместе с тем стоит напомнить, что уравнение Ван-дер-Ваальса тоже плохо описывает линию ФП Ж-Г даже для инертных газов. Экспериментальная кривая ФП Ж-Г в приведенных координатах лежит между результатами приведенных уравнений Ван-дер-Ваальса (van der Waals) и Бертло (Berthelot) [55]. Однако этот факт не мешает широко использовать уравнение Ван-дер-Ваальса для изучения качественных вопросов ФП Ж-Г. Поэтому представленный здесь формализм трехфазной модели можно использовать для изучения качественных вопросов ФП К-Ж. В данном случае на основе этой модели будет изучен вопрос изменения S-петли ФП К-Ж при уменьшении размера нано-системы.

МОДЕЛЬ НАНОКРИСТАЛЛА С ВАКАНСИЯМИ

Обобщим формализм из (4.2)-(4.20) на случай нанокристалла из $N + N_v = N/(1 - \phi_v)$ одинаковых ячеек, из которых N_v вакантных ячеек однородно распределено по объему нанокристалла. Как и в работах [37, 46-48] положим, что нанокристалл со свободной поверхностью имеет вид прямоугольного параллелепипеда с квадратным основанием, ограненный гранями типа (100) с геометрической поверхностью Гиббса. Ячейки образуют кристаллическую структуру с коэффициентом упаковки k_p. Величина $f = N_{ps}/N_{po} = N_{ps}^{o}/N_{po}^{o}$ – представляет собой параметр формы, который определяется отношением числа N_{ps}^{o} атомов (или $N_{ps} = N_{ps}^{o}/(1 - \phi_v)^{1/3}$ ячеек) на боковом ребре к числу N_{po}^{o} атомов (или $N_{po} = N_{po}^{o}/(1 - \phi_v)^{1/3}$ ячеек) на ребре квадратного основания. Для стержневидной формы $f > 1$, для куба $f = 1$, для пластинчатой формы $f < 1$.

Число ячеек и атомов в нанокристалле определенной формы (т.е. при данном f) равно:

$$N + N_v = f\,\frac{N_{po}^{\;3}}{\alpha} = f\,\frac{(N_{po}^{\;o})^3}{\alpha(1-\phi_v)}, \qquad N = f\,\frac{(N_{po}^{\;o})^3}{\alpha}, \tag{4.21}$$

где $\alpha = \pi/(6\,k_p)$ – параметр структуры.

Ограничение системы поверхностью приведет к обрыву связей на границе. Поэтому если использовано приближение «взаимодействия только ближайших соседей», то вместо первого координационного числа (k_n) необходимо брать $\langle k_n \rangle$ – среднее (по всей наносистеме) значение первого координационного числа, которое будет зависеть как от размера, так и от формы наносистемы. При этом структуру системы полагаем неизменной: k_p = const. Данную модель нанокристалла в виде прямоугольного параллелепипеда (Rectangular Parallelepiped), форму которого можно варьировать с помощью параметра формы f, назовем RP-моделью с вакансиями, или RP(vac)-моделью.

В рамках RP(vac)-модели зависимость среднего по наносистеме значения первого координационного числа от аргументов α, N, ϕ_v и f имеет вид [37, 56-58]:

$$k_n(N,\phi_v) = k_n^{o}(\infty)\cdot(1-\phi_v)\left[1 - Z_s(f)\cdot\left(\frac{\alpha^2}{N}(1-\phi_v)\right)^{1/3}\right], \tag{4.22}$$

где $k_n^{o}(\infty)$ – первое координационное число (т.е. число ближайших к данному атому занятых или вакантных ячеек) для макрокристалла,

$$Z_s(f) = \frac{1+2f}{3f^{2/3}}\ . \tag{4.23}$$

Функция формы $Z_s(f)$ достигает минимума равного единице при $f = 1$, т.е. для формы куба. Для пластинчатых ($f < 1$) или стержневидных ($f > 1$) форм значение функции формы больше единицы: $Z_s(f \neq 1) > 1$. Поэтому функция $k_n(f)^* = k_n(f)/k_n(\infty)$ при любом значении $N + N_v$ имеет максимум при $f = 1$, т.е. для наиболее энергетически устойчивой – кубической формы прямоугольного параллелепипеда.

Кубическая форма может реализовываться только при определенном числе ячеек, из которого можно построить куб: $(N + N_v)_{\text{cub}} = \text{INT}[(N_{po}^{o})^3/[\alpha(1 - \phi_v)]]$, где $N_{po}^{o} = 2, 3, 4,\ldots$, функция INT[$x$] округляет величину x до целого значения, ибо число атомов это величина целочисленная. При «некубичном» значении числа ячеек: $N + N_v \neq (N + N_v)_{\text{cub}}$ параллелепипед может иметь либо пластинчатую, либо стержневидную форму, причем выполняется: $k_n((N+N_v)_{\text{cub}} \pm 1)^* < k_n(N+N_v)_{\text{cub}}^*$.

Изоморфная (т.е. рассчитанная при f = const) зависимость $k_n(N+N_v)$ монотонно уменьшается при $N + N_v \to N_{\min} = \text{INT}[8/[\alpha(1 - \phi_v)]]$, но общая зависимость $k_n(N+N_v)$ имеет осциллирующий вид с максимумами в точках $k_n(N+N_v)_{\text{cub}}$, соответствующих нанокристаллам с кубической формой, и с минимумами при таких значениях $N + N_v \neq (N + N_v)_{\text{cub}}$, из которых можно построить только стержень. А так как многие свойства нанокристалла определяются именно значением $k_n(N)$, то зависимость этих свойств от N также будет иметь осциллирующий вид.

Таким образом, использование функции (4.22) в формализме (4.2)-(4.20) при k_p = const позволяет получить зависимость свободной энергии Гельмгольца, как от размера (числа атомов N), так и от формы нанокристалла при данных значениях температуры и удельного объема ($v = V/N$), для нанокристалла со свободной геометрической поверхностью Гиббса.

ДЕЛОКАЛИЗАЦИЯ АТОМОВ НА СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ ГИББСА

Здесь возникает вопрос о делокализации атомов на свободной поверхности Гиббса. С одной стороны атомы на поверхности можно считать делокализованными, т.к. они могут переходить в окружающее пространство и возвращаться (ибо наложено условие постоянства числа атомов в системе), находясь в динамическом равновесии с ним. Но, с другой стороны, т.к. поверхность не имеет толщины, то поверхностные атомы находятся в таких же термодинамических условиях, что и атомы внутри кристалла, и поэтому они должны делокализовываться по тому же способу, как и атомы в объеме нанокристалла.

Для изучения этого вопроса рассчитаем изотерму T = 150 K уравнения состояния аргона при уменьшении числа атомов в нано-системе. Расчёты показали, что S-петли ФП К-Ж и Ж-Г уменьшаются, но не исчезают даже при минимально возможном для RP(vac)-

модели значении: $N_{po}^{o} = 2$, т.е. при $N = \mathrm{INT}[(N_{po}^{o})^3/\alpha] = 11$. Из этого результата следует вывод, что атомы на поверхности Гиббса делокализуются по иному способу, чем атомы в объеме нанокристалла. Здесь для ГЦК структуры имеем: $\alpha = \pi/(6k_p) = 0.707$.

В RP(vac)-модели локализованный атом колеблется в ячейке, образованной ближайшими соседями. При этом для описания колебаний локализованных атомов используется модель Эйнштейна, т.е. колебательное движение локализованного атома рассматривается как колебания трех независимых гармонических осциллятора с одинаковой частотой. Но для атома колеблющегося на поверхности Гиббса некоторые направления являются свободными для ухода из ячейки. Поэтому движения в этих направлениях следует моделировать не как движения гармонического осциллятора, а как движение делокализованного атома.

В рамках RP(vac)-модели число ячеек (как занятых, так и свободных), лежащих на поверхности равно [37, 59]:

$$N_s = 4\,N_{ss} + 2\,N_{so} + 8\,N_{fo} + 4\,N_{fs} + 8\,. \qquad (4.24)$$

Здесь $N_{ss} = N_{fo}\,N_{fs}$ и $N_{so} = N_{fo}^2$ – число ячеек на поверхности боковой грани и грани основания (без учета ячеек на ребрах и вершинах); $N_{fs} = N_{ps} - 2$ и $N_{fo} = N_{po} - 2$ – число ячеек на боковом ребре и на ребре основания (без учета ячеек в вершинах) параллелепипеда. Тогда для RP(vac)-модели получим следующее выражение:

$$N_s = 2\,[(2f + 1)N_{po}^2 - 2(f + 2)N_{po} + 4]\,.$$

При этом число занятых ячеек (т.е. атомов) на поверхности Гиббса будет равно:

$$N_s^{o} = N_s(1 - \phi_v)\,.$$

Из них локализованными по «объемному способу», который описывается формулой (4.9), будет следующее число атомов:

$$N_{sl}^{o} = N_s^{o}(1 - x_{dv}) = N_s(1 - \phi_v)(1 - x_{dv}),$$

где x_{dv} – доля делокализованых атомов в объеме, которая рассчитывается по формулам (9) и (4.17), а функция ϕ_v рассчитывается по формулам (4.3), (4.15) и (4.16) при использовании значения x_{dv}, определенного для объема.

На поверхности боковой грани и грани основания из колебаний локализованного атома нужно исключить один гармонический осциллятор из трех, т.к. в этом, перпендикулярном грани, направлении делокализация будет происходить уже по иному, отличному от «объемного», способу. Для атома на боковом ребре и на ребре основания по аналогичным причинам нужно исключить два гармонических осциллятора, ибо гармонические колебания в ячейке совершает только тот осциллятор, который колеблется вдоль ребра. По этим же причинам следует считать, что атом в вершине делокализуется по отличному от «объемного» способа. Поэтому среди локализованных на поверхности Гиббса атомов некоторую часть (N_{ds}) следует считать делокализующимися по отличному от «объемного» способа. В рамках RP(vac)-модели для N_{ds} можно получить:

$$N_{ds} = [(4N_{ss} + 2N_{so})(1/3) + (8N_{fo} + 4N_{fs})(2/3) + 8](1 - \phi_v)(1 - x_{dv}) =$$
$$= (2/3)(2f + 1)N_{po}^2(1 - \phi_v)(1 - x_{dv}) = (2/3)(2f + 1)(N_{po}^{o})^2(1 - \phi_v)^{1/3}(1 - x_{dv}). \qquad (4.25)$$

Пусть x_{ds} – это вероятность делокализации атома на поверхности Гиббса способом, отличным от того, каким атом делокализуется в объеме. Тогда для доли общего числа делокализованных атомов в нано-системе получим:

$$x_d = \frac{(N - N_{ds})x_{dv} + N_{ds}x_{ds}}{N} = (1 - \eta_{ds})x_{dv} + \eta_{ds}x_{ds}, \qquad (4.26)$$

где доля атомов, делокализованных на поверхности Гиббса по отличному от «объемного» способа, равна:

$$\eta_{ds} = \frac{N_{ds}}{N} = \frac{2(2f + 2)}{3N}(N_{po}{}^{o})^2(1 - \phi_v)^{1/3}(1 - x_{dv}) = \frac{2(2f + 2)}{3f\ N_{po}{}^{o}}(1 - \phi_v)^{1/3}(1 - x_{dv}) =$$
$$= 2\frac{Z_s(f)}{(\alpha N)^{1/3}}(1 - \phi_v)^{1/3}(1 - x_{dv}) \qquad . \qquad (4.27)$$

Из (4.27) видно, что для идеального ($x_{dv} = 0$ и $\phi_v = 0$) нанокристалла функция $\eta_{ds}(N)$ плавно убывает от $\eta_{ds} = 1$ при $N = 11$ и $Z_s(f=1) = 1$ (или $N_{po}{}^{o} = 2$ и $f = 1$) до нуля при $N \to \infty$.

Пусть делокализация атома со свободной поверхности Гиббса связана с переходом атома в газовую фазу и возвратом атома обратно. Тогда для величины энергии делокализации атома в формуле (4.9) можно принять: $E_{ds} = m\langle v\rangle^2/2$, где $\langle v\rangle$ – некоторая, характерная для газовой среды, скорость атома. Если брать $\langle v\rangle$ как наиболее вероятную

скорость ($<v> = (2k_BT/m)^{1/2}$), или как среднеквадратичную скорость атомов в газе ($<v> = (3k_BT/m)^{1/2}$) [36; 42, стр. 117], то можно получить: $E_{ds}/(k_BT) = 1$ (если $<v>$ это наиболее вероятная скорость атомов) – 1.5 (если $<v>$ это среднеквадратичная скорость атомов). Поэтому, в соответствии с (4.9), величина x_{ds} будет равна постоянной величине: $x_{ds} = 0.392$ (если $<v>$ это среднеквадратичная скорость атомов), $x_{ds} = 0.572$ (если $<v>$ это наиболее вероятная скорость атомов). В соответствии с этим, для простоты можно принять: $x_{ds} = 0.5$.

РАСЧЕТ ИЗОТЕРМ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ НАНО-СИСТЕМЫ

Используя формализм RP(vac)-модели из (4.21)-(4.23) и полученные для поверхности Гиббса выражения (4.25)-(4.27), трехфазная модель простого вещества была обобщена на случай нано-системы. Подставляя в формализм из (4.2)-(4.20) формул (4.23) и (4.26), было получено аналитическое выражение для зависимости $f_H(T, v; N, f)$. Нормированное уравнение состояния было получено путем численного дифференцирования изотермической зависимости функции f_H/D по нормированному объему:

$$\frac{P\,v_{\text{o}}}{D} = -\left[\frac{\partial(f_H/D)}{\partial(v/v_{\text{o}})}\right]_T .$$

Расчет изотермо-изоморфных (т.е. при постоянных значениях T и f) зависимостей уравнения состояния для ГЦК-Ar показал, что при уменьшении числа атомов S-петли ФП К-Ж и Ж-Г на изотерме уменьшаются. На Рис. 4. 3 показаны изотермо-изоморфные (T = 150 K, f = 1) зависимости нормированного давления от нормированного объема при следующих значениях числа атомов в системе: $N_{po}^{\text{o}} = 10^8$, т.е. $N = 1.4\times10^{24}$ = Macro – сплошная линия; $N_{po}^{\text{o}} = 20$, т.е. $N = \text{INT}[(N_{po}^{\text{o}})^3/0.707] = 11315$ – пунктирная линия; $N_{po}^{\text{o}} = 8$, т.е. $N = 724$ – линия с коротким пунктиром; $N_{po}^{\text{o}} = 6$, т.е. $N = 305$ – точечная линия; $N_{po}^{\text{o}} = 2$, т.е. $N = 11$ – штрих-пунктирная линия.

Как видно из Рис. 4. 3 для изотермы T = 150 K, при определенном значении числа атомов (N_0) S-петля ФП К-Ж исчезает. Расчеты показали, что S-петля ФП К-Ж для кубического (f = 1) нанокристалла исчезает при $N_{po}^{\text{o}} = 7$, т.е. $N_0 = 485$ для изотермы T = 150 K, и при $N_{po}^{\text{o}} = 3$, т.е. $N_0 = 38$ для изотермы T = 60 K.

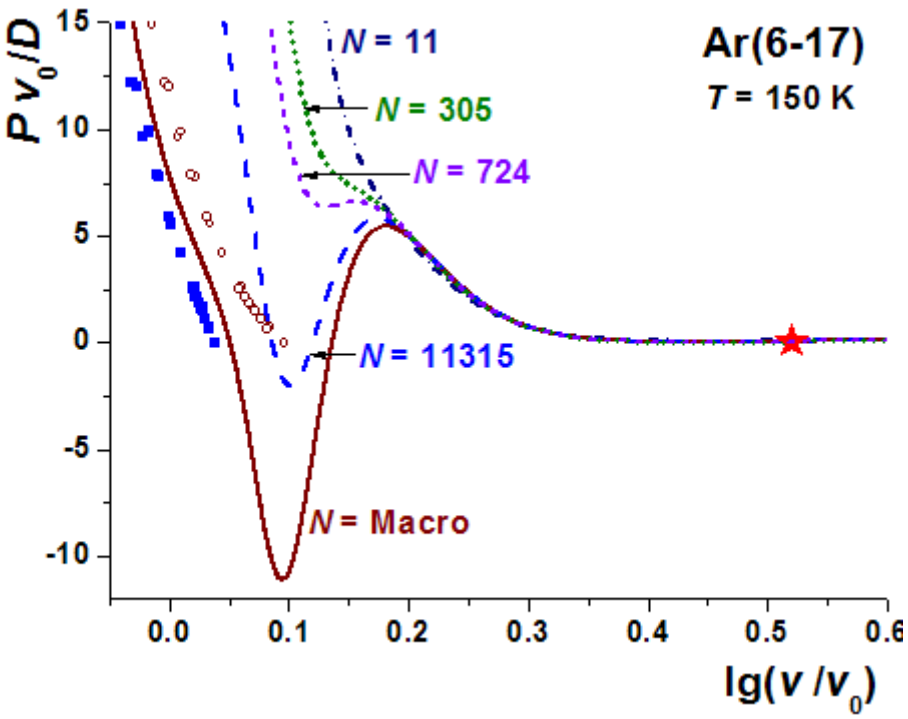


Рисунок4. 3. Изменение изотермы T = 150 K уравнения состояния аргона при изоморфном (при f = 1) уменьшении числа атомов в нано-системе. Экспериментальные бинодали ФП К-Ж для макросистемы из [45, 47-49] показаны символами: для кристалла сплошными кубиками, для жидкой фазы полыми кружками. Положение экспериментальной критической точки ФП Ж-Г для макросистемы из [50] показано звездочкой.

Величина N_0 увеличивается как с ростом температуры на изотерме, так и при отклонении формы нано-системы от наиболее энергетически оптимальной формы (для RP(vac)-модели это куб). В кластере из $N < N_0$ атомов ФП К-Ж уже нет. Такой кластер при изотермическом увеличении удельного объема $v = V/N$ плавно переходит в жидкую фазу.

Заметим, что для изомерно-изоморфной нано-системы (т.е. с такими же значениями N и f) находящейся на подложке величина N_0 будет меньше, чем значение N_0 для свободной (безопорной (free-standing)) нано-системы при тех же T-v-условиях. Это обусловлено тем, что для нано-системы на подложке величина x_d будет меньше, чем для нано-системы со свободной поверхностью.

Отметим, что при уменьшении числа атомов S-петля для ФП Ж-Г также уменьшается. На Рис. 4. 4 показаны изотермы для нано-системы из 177 атомов в области критической точки ФП Ж-Г. Расчеты показали, что при переходе от макросистемы к нано-системе из 177 атомов критическая температура уменьшается от T_{cr}(Macro) = 249 K до T_{cr}(N=177) = 237 K. На Рис. 4. 4 положение критической точки ФП Ж-Г для макросистемы показано верхним кружком. Таким образом при уменьшении числа атомов параметры критической точки для ФП Ж-Г изменяются следующим образом: критические температура и давление уменьшаются, а критический удельный объем возрастает. Это

согласуется как с экспериментальными, так и с теоретическими результатами по смещению параметров критической точки различных веществ в нанопорах [60, 61]. Но применять модель нано-системы в виде прямоугольного параллелепипеда со свободной поверхностью Гиббса для изучения количественных сдвигов ФП Ж-Г с уменьшением N не вполне корректно. Поэтому эти оценки для ФП Ж-Г можно рассматривать только как качественные.

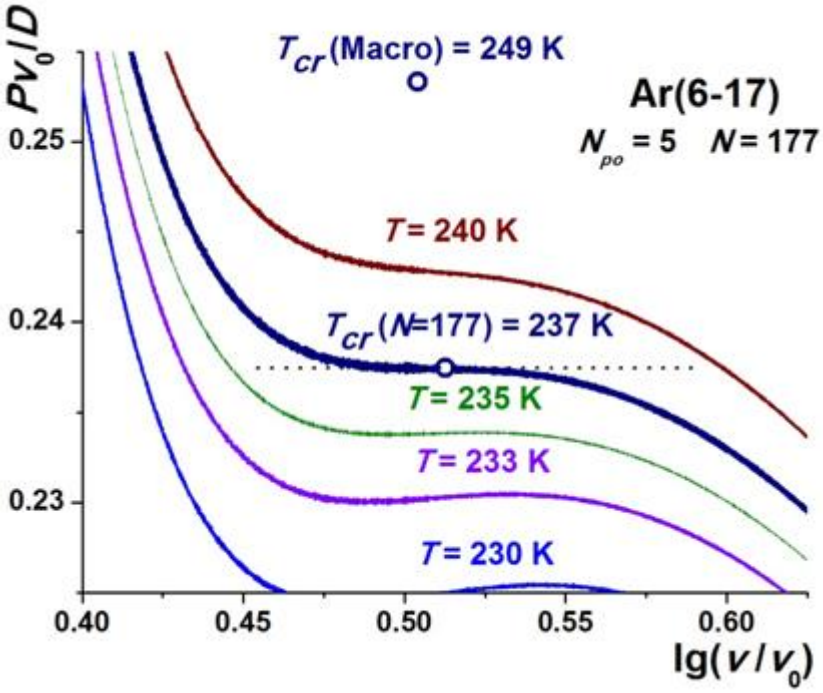


Рисунок 4. 4. Изотермы наносистемы из 177 атомов в области критической точки фазового перехода Ж-Г при T_{cr}(N=177) = 237 К. Верхняя окружность указывает положение расчетной критической точки фазового перехода Ж-Г для макросистемы при T_{cr}(Macro) = 249 К.

ВЫВОДЫ

На основе предложенных ранее трехфазной модели простого вещества и RP(vac)-модели нанокристалла получено выражение для свободной энергии Гельмгольца для нанокристалла, в котором имеются как вакансии в решетке, так и делокализованные (диффундирующие) атомы.

Предложена модель поверхности Гиббса, на которой часть ячеек вакантна, а часть атомов находится в делокализованном состоянии, причем, из делокализованных атомов часть делокализована по «объемному» способу, а часть – по «поверхностному» способу.

Расчеты уравнения состояния, проведенные для макросистемы аргона, показали, что при средних температурах на изотермах уравнения состояния есть две S-петли, соответствующие ФП К-Ж и Ж-Г. При высоких температурах S-петля ФП Ж-Г стягивается в критическую точку. При низких температурах две S-петли ФП К-Ж и Ж-Г

сливаются в одну большую S-петлю, соответствующую ФП кристалл-газ.

Показано, что при уменьшении числа атомов N в нано-системе S-петли ФП К-Ж и ФП Ж-Г на изотерме уравнения состояния уменьшаются, а при определенном значении числа атомов (N_0) S-петля ФП К-Ж исчезает. Величина N_0 увеличивается как с ростом температуры на изотерме, так и при отклонении формы нано-системы от наиболее энергетически оптимальной формы (для RP(vac)-модели это куб). В кластере из $N < N_0$ атомов ФП К-Ж уже нет. Такой кластер при изотермическом увеличении удельного объема плавно переходит в жидкую фазу. Этот вывод согласуется с результатами работы [32], где на основе электронно-статистической модели было показано, что межфазная энергия кристаллических граней на границе с собственным расплавом для 4*d*- и 5*d*-металлов нелинейно уменьшается при уменьшении размера нанокристалла, а при определенном размере исчезает.

Таким образом, показано, что теоретически предсказанное в [3, 33] исчезновение ФП К-Ж обусловлено ростом доли делокализованных атомов при уменьшении размера нано-системы.

В заключение отметим, что при уменьшении числа атомов в системе возрастают флуктуации различных термодинамических параметров. Исходя из этого факта и полученного здесь результата (что при $N \to N_0$ уменьшается энергетический барьер между жидкой и твердой фазами), можно указать на ряд эффектов, которые могут реализоваться в нано-системах. Например:

1) Начиная с определенного размера $N_F > N_0$ может наблюдаться осцилляция ФП К-Ж.

2) Как следствие данной осцилляции ФП К-Ж также может наблюдаться осцилляция формы (габитуса) нанокристалла.

3) Также может наблюдаться осцилляция кристаллической структуры нанокристалла, включая появление таких структур, которые в макрокристалле не наблюдаются.

4) Если дать нано-системе электрический заряд или поместить ее во внешнее электрическое поле, то как показано в [34], указанные осцилляции ФП К-Ж могут генерировать электромагнитные волны.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В соответствии с Планом Института проблем геотермии и возобновляемой энергетики, филиала Объединенного института высоких температур РАН (направление 3.2: «Физико-технические и экологические проблемы энергетики; тепломассообмен; теплофизические и электрофизические свойства веществ; низкотемпературная плазма и технологии на ее основе») по теме «Моделирование процессов тепломассопереноса и теплофизических свойств мультифазных и структурированных соединений в широком диапазоне состояний, включая экстремальные, присущие внешнему ядру Земли» был получен ряд новых оригинальных результатов, несущих научную новизну, и имеющих фундаментальное и прикладное значение. В частности можно выделить следующие основные результаты:

1. Разработана разностная схема для численного решения краевой задачи для системы уравнений неизотермической фильтрации с использованием производной дробного порядка Caputo по времени. Доказана устойчивость разностной схемы. Проведен вычислительный эксперимент по анализу полученных решений. Во фрактальной среде, в отличие от сплошной среды, физические процессы протекают медленнее. Это объясняется тем, что случайно блуждающая частица удаляется от места старта медленнее, так как не все направления движения становятся для нее доступными. Вычислены значения давления и температуры в зависимости от координаты радиуса пласта и времени и построены графики динамики изменения давления и температуры по радиусу пласта и в зависимости от времени. Установлено замедление процессов со временем в решениях с дробными производными, что характерно фрактальным средам. Результаты доложены на конференциях и опубликованы в ведущем научном журнале (см. [4], здесь и далее из приложенного перечня публикаций коллектива исполнителей темы за 2019 год).

2. Проведён анализ экспериментальных температурно-барических зависимостей теплопроводности естественных и искусственных композитных материалов. Рассмотрены экспериментальные данные для ряда горных пород и искусственных композитных соединений при гидростатическом давлении 0.1-400 МПа в температурном диапазоне 273-523 К. Выявлено, что для всех образцов характерна степенная температурная зависимость теплопроводности при фиксированном давлении на всем исследуемом диапазоне давлений. Анализ изотермической барической зависимости теплопроводности показал, что для большинства соединений она описывается двухпараметрическим законом. Таким образом, предложено малопараметрическое описание температурно-барической зависимости, по экспериментальным данным методом наименьших квадратов вычислены

входящие в уравнение величины. Результаты докладывались на международных конференциях в России и Италии, опубликованы в журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, а также отечественных изданиях, входящих в список ВАК (см [13, 18]). Помимо этого проведен ряд исследований в области температурно-барических свойств (в том числе термоэдс) полупроводниковых материалов. Результаты докладывались на международных конференциях (см. [32]). Работы в данном направлении продолжаются.

3. На основании совместных с зарубежными коллегами экспериментальных результатов исследована динамика квазипараллельных ударных волн, инициируемых лазерным излучением, в композитных мишенях с первым (абляционным) слоем пониженной плотности. Проведен сравнительный анализ результатов моделирования. Установлен и объяснен эффект перераспределения давления при взаимодействии близких квазипараллельных ударных волн в композитных мишенях. Обнаружен эффект существенного замедления скорости распространения ударных волн в малоплотном слое, который может приводить к инверсной зависимости времени достижения ударной волной тыльной стороны мишени от энергии лазерного импульса. По результатам исследований был сделан устный доклад на Международной конференции в Польше, принята к публикации статья в рецензируемом журнале Acta Physica Polonica (см. [29]).

4. На основе предложенных ранее трехфазной модели простого вещества и RP(vac)-модели нанокристалла получено выражение для свободной энергии Гельмгольца нанокристалла, в котором имеются как вакансии в решетке, так и делокализованные (диффундирующие) атомы. Предложена модель поверхности Гиббса, на которой часть ячеек вакантна, а часть атомов находится в делокализованном состоянии. Учтено, что часть делокализованных атомов делокализована по «объемному» способу, а часть – по «поверхностному» способу. Расчеты уравнения состояния были проведены для аргона, атомы которого взаимодействуют посредством парного потенциала Ми-Леннард-Джонса. Расчеты для макросистемы показали, что при средних температурах уравнение состояния имеет две S-петли на изотермах, соответствующие фазовым переходам (ФП) кристалл-жидкость (К-Ж) и жидкость-газ (Ж-Г). При высоких температурах S-петля ФП Ж-Г стягивается в критическую точку. При низких температурах две S-петли ФП К-Ж и Ж-Г сливаются в одну большую S-петлю, соответствующую ФП кристалл-газ. При уменьшении числа атомов (N) в нано-системе S-петли ФП К-Ж и ФП Ж-Г на изотерме уменьшаются, а при определенном значении числа атомов (N_0) S-петля ФП К-Ж исчезает. Показано, что величина N_0 увеличивается как с ростом температуры на изотерме, так и при отклонении формы нано-системы от наиболее энергетически оптимальной формы (для RP(vac)-модели это куб). В кластере из $N < N_0$ атомов ФП К-Ж уже нет. Такой

кластер при изотермическом увеличении удельного объема плавно переходит в жидкую фазу. Данные результаты опубликованы нами в работах [1, 12, 26, 43] из списка научных публикаций по теме за отчетный период 2019 года.

Помимо вышеизложенных основных результатов:

В рамках трехфазной статистической модели простого макро-вещества исследованы размерные зависимости теплофизических свойств молибдена, золота и ниобия в изобарических условиях (см. [3, 39-41]),

Совместно с коллегами из Дагестанского государственного университета проведены исследования по разряду в сильном продольном магнитном поле. Результаты доложены на международных конференциях в России и Италии, опубликованы в журналах, индексируемых Web of Science и Scopus (см. [2, 15-17, 19]) будут представлены в следующих отчетах, работа продолжается.

Продолжены работы по расчету термодинамических характеристик веществ, имеющих фундаментальное и прикладное значение, на основе фрактального уравнения состояния (см. [37]).

Проведены исследования по объяснению электрических свойств конденсированного состояния в рамках фрактального подхода. Сделан доклад на международной конференции в Италии (см. [33]), работа продолжается.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Алишаев М.Г., Розенберг М.Д., Теслюк Е.В.- Неизотермическая фильтрация при разработке нефтяных месторождений. Москва.. – «Недра» . – 1985. – 271 с.
2. Лейбензон Л.С. Движение природных жидкостей и газов в пористой среде. – ОГИЗ, Гостехиздат. – 1947. – 244 с.
3. Бочевер Ф.М., Гармонов И.В., Лебедев А.В., Шестоков В.М. Основы гидрогеологических расчетов. – Москва. – «Недра» . – 1965. – 306 с.
4. Мейланов Р.П. К теории фильтрации в пористых средах с фрактальной структурой.// Письма ЖТФ. – 1996. – Т.22. – вып.23. – С. 40-42.
5. Beybalaev V.D., Abduragimov E.I., Yakubov A.Z., Meilanov R.R., Aliverdiev, A.A. Numerical research of non-isothermal filtration process in fractal medium with non-locality in time // Thermal Science. – 2019. – OnLine-First.
6. Beybalaev V.D., Meilanov R.R. The Dirihlet problem for the fractional poisons equation with Caputo Derivatives: A finite difference approximation and a numerical solution.- Thermal Science. – 2012. – Т. 16. – №2. – С. 385-394.
7. Бейбалаев В.Д., Аливердиев А.А., Магомедов Р.А., Мейланов Р.Р., Ахмедов Э.Н. Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. – 2017. – Т.21. – №2. – С. 378-387.
8. Нахушев А.М. Дробное исчисление и его применение. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 272 с.
9. Бейбалаев В.Д., Абдуллаев И. А., Наврузова К.А., Гаджиева Т.Ю. О разностных методах решения задачи Коши для ОДУ с оператором дробного дифференцирования.// Вестник ДГУ, вып. 6. – 2014. – С. 53-61.
10. Beibalaev V.D., Shabanova M.R. A Finite-Difference scheme for solution of a fractional heat diffusion-wave equation without initial conditions.// Thermal science. – 2015. – Т. 19, №2. – С. 531-536.
11. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. – М.: Физматгиз. – 1963. – 121 с.
12. Оскотский В.С., Смирнов И.А. Дефекты в кристаллах и теплопроводность. – М.: Наука. – 1972. – 160 с.
13. Eucken A. Über die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit fester Nichtmetalle // Ann. d. Phys. – 1911. – V. 339. – Issue 2. – P. 185-221
14. Debye P., Nernst W., Smoluchowski M., et al. Vorträge über die Kinetische Theorie der Materie und Electricitat. Berlin: B.G. Teubner. – 1914. – 196 p.

15. Займан Д. Электроны и фононы. – М.: ИЛ. – 1962. – 488 с.
16. Эмиров С.Н., Бейбалаев В.Д., Рамазанова А.Э., Давудов И.А., Амирова А.А., Аливердиев А.А. О температурных и барических закономерностях изменения теплопроводности композитных материалов // Известия РАН, Серия Физическая. 2018. – Т. 82. – № 7. – С. – 142–145
17. Emirov S.N., Beybalaev V.D., Gadzhiev G.G., Ramazanova A.E., Amirova A.A., and Aliverdiev A.A. To the description of the temperature and pressure dependences of the thermal conductivity of sandstone and ceramics // Journal of Physics: Conference Series. 2017. – V. 891. – 012335
18. Эмиров С.Н., Бейбалаев В.Д., Рамазанова А.Э., Гаджиев Г.Г., Амирова А.А., Аливердиев А.А. О температурных и барических закономерностях изменения теплопроводности горных пород // Вестник Новгородского государственного университета им. Ярослава Мудрого. – 2017. – Т. 103. – №5. – С. 52-66
19. Эмиров С.Н., Алхасов Ш.М., Бейбалаев В.Д., Рамазанова А.Э., Амирова А.А., Гаджиев Г.Г. и Аливердиев А.А. Описание температурно-барической зависимости теплопроводности естественных и искусственных композитов // ТПТ. – 2019. – Т. 11. – №3. – С. 34-38.
20. Emirov S.N., Beybalaev V.D., Amirova A.A., Ibragimov A.I., and Aliverdiev A.A., Thermal Conductivity Temperature-Pressure Dependence of Rocks and Ceramics // Journal of Physics: Conf. Series. – 2019. – V. 1172. – 012006
21. Jungwirth K., Cejnarova A., Juha L. et al. The Prague Asterix Laser System // Phys. Plasmas. – 8. – 2001. – P. 2495
22. Ramis R. Meyer-ter-Vehn J., and Ramírez J. MULTI2D – a computer code for two-dimensional radiation hydrodynamics // Computer Physics Communications. – 2009. – Vol. 180. – 977-994.
23. Lyon S.P., Johnson J.D. Group T-1 (Ed.) *SESAME: The LANL Equation of State Database* / Los Alamos National Laboratory. – LA-UR-92-3407. – 1992.
24. Kemp A.J. and Meyer-ter-Vehn J. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A.*. – 1998 – 415. – 674-676.
25. A. Colaïtis, G. Duchateau, X. Ribeyre, et al., *Phys. Rev. E*. – V 2015. – V. 92. – V 041101(R)
26. Aliverdiev A., Batani D., Benocci R., Dezulian R., Amirova A., Ragimkhanov G., Krousky E., Ullschmied J., Skala J., Dudzak R., Jakubowska K. About laser shocks dynamics for complex focal spots and structured targets // J. Phys.: Conf. Ser. – 2018. – Vol. 946. – 012013.

27. Aliverdiev A., Batani D., Benocci R., Dezulian R., Amirova A., Krousky E., Pfeifer M., Skala J., Dudzak R., Jakubowska K. Some Peculiarities of Laser Shocks Propagation in Foam-Solid Targets // Contributions of International Conference on Research and Applications of Plasmas (Plasma 2019), Opole, Poland, July 15-19, 2019, O3.1, P. 44.
28. Aliverdiev A., Batani D., Antonelli L., et al. Use of multilayer targets for achieving off-Hugoniot states // Phys. Rev. E. – 2014. – Vol. 89. – 053101.
29. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений 2-е изд.– М.: Наука, 1966. – 688 с.
30. Benocci R., Batani D., Dezulian R., et al. Gas-induced smoothing of laser beams studied by interaction with thin foils *Plasma Physics Contr. Fusion*. – 2008. – V. **50** (11). – 11500.
31. Lai S.L., Guo J.Y., Petrova V., Ramanath G., Allen L.H. Size-Dependent Melting Properties of Small Tin Particles: Nanocalorimetric Measurements // Physical Review Letters. 1996. V. 77. № 1. P. 99 – 102. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.99
32. Ercolessi F., Andreoni W., Tosatti E. Melting of small gold particles: Mechanism and size effects // Physical Review Letters. – 1991. – V. 66. – № 7. – P. 911 – 914.
33. Магомедов М.Н. О вычислении размерных зависимостей параметров фазового перехода кристалл-жидкость // Журнал Технической Физики. – 2014. – Т. 84. – № 5. – С. 46–51. –
34. Гиббс Дж. В. Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука. – 1982. – 584 с.
35. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука. – 1976. – 584 с.
36. Мелвин-Хьюз Э.А. Физическая химия. В 2-х томах. М.: Изд-во Иностранной Литературы. – 1962. – 1148 с.
37. Магомедов М.Н. Изучение межатомного взаимодействия, образования вакансий и самодиффузии в кристаллах. М.: Физматлит. – 2010. – 544 с.
38. Магомедов М.Н. Об уравнении состояния простого вещества, описывающем трехфазное равновесие // Вестник Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Серия: Естественные науки. — 2013. — № 2. — С. 28 – 42.
39. Магомедов М.Н. О самодиффузии в железе при сильном сжатии кристалла // Физика Металлов и Металловедение. — 2013. — Т. 114. — № 3. — С. 227 – 236.
40. Магомедов М.Н. О параметрах образования вакансий в кристаллах подгруппы углерода // Физика и Техника Полупроводников. – 2008. – Т. 42. – № 10. – С. 1153 – 1164.

41. Магомедов М.Н. О параметрах самодиффузии в кристаллах подгруппы углерода // Физика и Техника Полупроводников. – 2010. – Т. 44. – № 3. – С. 289 – 301.
42. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во Иностранной Литературы. – 1961. – 931 с.
43. Магомедов М.Н. О температуре Дебая и параметрах Грюнайзена для ГПУ кристаллов из молекул p-H_2 и o-D_2 // Журнал Технической Физики. – 2013. – Т. 83. – № 9. – С. 56 – 62.
44. Жирифалько Л. Статистическая физика твердого тела. М.: Мир. – 1975. – 383 с.
45. Стишов С.М. Термодинамика плавления простых веществ // Успехи Физических Наук. – 1974. – Т. 114. – № 1. – С. 3 – 40.
46. Стишов С.М. Энтропия, беспорядок, плавление // Успехи Физических Наук. – 1988. . – Т. 154. – № 1. – С. 93 – 122.
47. Crawford R.K., Daniels W.B. Melting in Argon at High Temperatures // Physical Review Letters. – 1968. – V. 21. – № 6. – P. 367 – 369.
48. Crawford R.K., Daniels W.B. Equation-of-State Measurements in Compressed Argon // Journal of Chemical Physics. – 1969. – V. 50. – № 8. – P. 3171 – 3183.
49. Стишов С.М., Федосимов В.И., Макаренко И.Н. Уравнение состояния и кристаллизация аргона. М.: Изд-во Ин-та Кристаллографии АН СССР, 1972. 56 с.
50. March N.H., Tosi N.P. Introduction to Liquid State Physics. London: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2002. – 432 p.
51. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия. – 1982. – 592 с.
52. Brostow W., Sicotte Y. Coordination Number in Liquid Argon // Physica A. – 1975. – V. 80A. – № 5. – P. 513 – 522.
53. Mikolaj G.J., Pings C.J. Structure of Liquids // Journal of Chemical Physics. – 1967. – V. 46. – № 4. – P. 1401 – 1411.
54. Pings C.J. / In «Physics of Simple Liquids». Edited by H.N.V. Temperley, J.S. Rowlinson, G.S. Rushbrooke. Amsterdam: N.-Holland Publish. Comp. – 1968. – P. 9 – 66.
55. Собко А.А. Обобщенное уравнение состояния Ван-дер-Ваальса-Бертло // Доклады РАН. – 2008. – Т. 412. – № 5. – С. 617 – 620. –
56. Магомедов М.Н. О зависимости поверхностной энергии от размера и формы нанокристалла // Физика Твердого Тела. – 2004. – Т. 46. – № 5. – С. 924 – 937.
57. Магомедов М.Н. О статистической термодинамике «безопорного» нанокристалла: кремний // Кристаллография. – 2017. – Т. 62. – № 3. – С. 487– 504.

58. Магомедов М.Н. Уравнение состояния нанокристалла с вакансиями // Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исслед. – 2018. – № 2. – С. 103 – 116.
59. Магомедов М.Н. О влиянии формы поверхности нанокристаллов на их свойства // Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исслед. – 2005. – № 1. – С. 94 – 104.
60. Zarragoicoechea G.J., Kuz V.A. Van der Waals equation of state for a fluid in a nanopore // Physical Review E.. – 2002. – V. 65. – № 2. – P. 021110 (1-4).
61. Islam A.W., Patzek T.W., Sun A.Y. Thermodynamics phase changes of nanopore fluids // Journal of Natural Gas Science and Engineering. – 2015. – V. 25. – P. 134 – 139.
62. Арефьева Л.П., Шебзухова И.Г. Межфазная энергия на границе металлический кристалл–расплав // Физика Твердого Тела. – 2018. – Т. 60. – № 7. – С. 1270 – 1276.
63. Магомедов М.Н. О размерной зависимости спинодалей фазового перехода кристалл-жидкость // Теплофизика Высоких Температур. – 1992. – Т. 30. № 3. – С. 470 – 476.
64. Григорьев А.И., Колбнева Н.Ю., Ширяева С.О. Квадрупольное электромагнитное излучение осциллирующей заряженной капли // Журнал технической физики. – 2017. – Т. 87. – № 6. – С. 914 – 920.

ПРИЛОЖЕНИЕ
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО НИР за 2019

Статьи в рецензируемых периодических журналах, входящие в базы данных Web of Science и/или Scopus

1. Magomedov M.N. The change in the phase diagram of a simple substance at decreasing of the nano-system size // Journal of Molecular Liquids. – 2019. – V. 285. – P. 106 – 113. **Impact Factor= 4.561 Q1.** DOI: 10.1016/j.molliq.2019.04.032
2. Omarov O.A., Omarova N.O., Omarova P.Kh., and Aliverdiev A.A. Breakdown of high-pressure gases in a longitudinal magnetic field // High Temperature. – 2019. – V. 57. – No. 2. – 174-182. **Impact Factor=1.164. Q1.** DOI: 10.1134/S0040364419020169
3. Akhmedov E.N. Size dependence of molybdenum melting temperature // Physica B: Condensed Matter. – V. 571. – P. 252-256 **Impact Factor=1.874 Q2.** DOI: 10.1016/J.PHYSB.2019.07.027
4. Beybalaev V.D., Abduragimov E.I., Yakubov A.Z., Meilanov R.R., Aliverdiev, A.A. Numerical research of non-isothermal filtration process in fractal medium with non-locality in time // Thermal Science. – 2019. – OnLine-First. **Impact Factor=1.541. Q2.** DOI: 10.2298/TSCI190223328B
5. Magomedov M.N. A Change in the Debye Temperature of a Single-Component Substance upon Amorphization // Technical Physics Letters, 2019, Vol. 45, No. 10, pp. 1042–1046. **Impact Factor=0.773. Q2.** DOI: 10.1134/S1063785019100249
6. Magomedov M.N. Change in thermodynamic properties of a germanium nanocrystal with a decrease in its size under various P-T-conditions // Nanotechnologies in Russia. – 2019. – Vol. 14, No. 1-2. – P. 21 – 32. **Impact Factor=0.760. Q2.** DOI: 10.1134/S1995078019010063
7. Magomedov M.N. Size Dependence of Elastic Properties of Argon Nanocrystals // Physics of the Solid State. – 2019. – V. 61. – No. 1. – P. 160–166. **Impact Factor=0.821. Q3**. DOI: 10.1134/S1063783419010165
8. Magomedov M.N. Changes of the Thermodynamic Properties at Isochoric and Isobaric Decrease of the Silicon Nanocrystal Size // Physics of the Solid State. – 2019. – V. 61. – No. 4. – P. 642–649. **Impact Factor=0.950. Q3**. DOI: 10.1134/S106378341904019X
9. Magomedov M.N. Changes in the Thermodynamic Properties of a Si-Ge Solid Solution at a Decrease of the Nanocrystal Size // Physics of the Solid State. – 2019. – V. 61. – No. 11. – P. 2145–2154. **Impact Factor=0.950. Q3**. DOI: 10.1134/S1063783419110210

10. Magomedov M.N. Variations of the ^{13}C Diamond Properties under Isothermal Compression // Technical Physics. – 2019. – V. 64. – No. 6. – P. 834–838. **Impact Factor=0.637. Q3**. DOI: 10.1134/S1063784219060100
11. Magomedov M.N. Dependence of the Elastic Modulus of on the Size and Shape of an Argon Nanocrystal // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – V. 13. – No. 3. – P. 548–554. **Impact Factor=0.360. Q3**. DOI: 10.1134/S1027451019030273
12. Magomedov M.N. On the Disappearance of the Crystal-Liquid Phase Transition as the Number of Atoms in the System Decreases // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2019. – V. 13. – No. 5. – P. 880 – 888. **Impact Factor=0.360. Q3**. DOI: 10.1134/S1027451019050070
13. Emirov S.N., Beybalaev V.D., Amirova A.A., Ibragimov A.I., and Aliverdiev A.A., Thermal Conductivity Temperature-Pressure Dependence of Rocks and Ceramics // Journal of Physics: Conf. Series. – 2019. – V. 1172. – 012006. **Impact Factor=0.360. Q3**. DOI: 10.1088/1742-6596/1172/1/012006
14. Magomedov M.N. Change in baric properties with decreasing size of germanium nanocrystal // Journal of Physics: Conf. Series.– 2019. – 1348. – 012013 **Impact Factor=0.360. Q3**. DOI: 10.1088/1742-6596/1348/1/012013
15. Omarov O.A., Omarova N.O., Omarova P.Kh., Khachalov M.B., and Aliverdiev A.A. Radiation from Hot Plasma of High-Pressure Discharge in Magnetic Field // Journal of Physics: Conf. Series. – 2019. – 1172. – 012005. **Impact Factor=0.360. Q3**. DOI:10.1088/1742-6596/1172/1/012005
16. Omarov O.A., Omarova N.O., Omarova P.Kh., and Aliverdiev A.A., Possibility of obtaining hot plasma during the breakdown of high-pressure gases in strong magnetic fields // Journal of Physics: Conf. Series.– 2019. – 1383. – 012018. **Impact Factor=0.360. Q3**. DOI: 10.1088/1742-6596/1383/1/012018
17. Omarov O.A., Omarova N.O., Omarova P.Kh., and Aliverdiev A.A. High-pressure gases breakdown in strong longitudinal magnetic fields // Europhysics Conference Abstracts – 2019. – V. 43. – P2.3005 (1-4), 47th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Milan, Italy, July 8-14, 2019 http://ocs.ciemat.es/EPS2019PAP/pdf/P2.3005.pdf (Scopus)

Статьи в журналах и изданиях, входящих в перечень ВАК

18. Эмиров С.Н., Алхасов Ш.М., Бейбалаев В.Д., Рамазанова А.Э., Амирова А.А., Гаджиев Г.Г. и Аливердиев А.А. Описание температурно-барической зависимости

теплопроводности естественных и искусственных композитов // ТПТ (Тепловые процессы в технике). – 2019. – Т. 11. – №3. – С. 34-38. (ВАК, номер в Перечне рецензируемых научных изданий (по состоянию на 09.08.2018) – 1969) ISSN: 2074-2649

19. Омаров О.А., Омарова Н.О., Омарова П.Х., Аливердиев А.А., Пробой газов высокого давления в продольном магнитном поле // ТВТ. – 2019. Т. 57. – № 2. – С. 1–9. DOI_R: 10.1134/S0040364419020169 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 – 816) Импакт-фактор РИНЦ – 1.649
20. Магомедов М.Н. Изменение температуры Дебая при аморфизации однокомпонентного вещества // Письма в Журнал Технической Физики. – 2019. – Т. 45, № 20. – С. 32-35. DOI_R: 10.21883/PJTF.2019.20.48391.17944 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 – 702)
21. Магомедов М.Н. Размерная зависимость упругих свойств нанокристалла аргона // Физика Твердого Тела. – 2019. – Т. 61, № 1. – С. 148 – 153. DOI_R: 10.21883/FTT.2019.01.46905.175 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 –858)
22. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств при изохорическом и изобарическом уменьшении размера нанокристалла кремния // Физика Твердого Тела. – 2019. – Т. 61, № 4. – С. 757 – 764. DOI_R: 10.21883/FTT.2019.04.47426.267 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 –858)
23. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств твердого раствора Si-Ge при уменьшении размера нанокристалла // Физика Твердого Тела. – 2019. – Т. 61, № 11. – С. 2169-2177. DOI_R: 10.21883/FTT.2019.11.48424.484 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 –858)
24. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств при уменьшении размера нанокристалла германия в различных P-T-условиях // Российские Нанотехнологии. – 2019. – Т. 14, № 1-2. – С. 24 – 35. DOI_R: 10.21517/1992-7223-2019-1-2-24-35 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 –757)
25. Магомедов М.Н. О зависимости модуля упругости от размера и формы нанокристалла аргона // Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон. исслед. – 2019, № 6. – С. 93 – 100. DOI_R: 10.1134/S0207352819060076 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 –707)
26. Магомедов М.Н. Об исчезновении фазового перехода кристалл-жидкость при уменьшении числа атомов в системе // Поверхность. Рентген., синхротр., и нейтрон.

исслед. – 2019, № 9. – С. 103 – 112. DOI_R: 10.1134/S0207352819090075 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 –707)

27. Магомедов М.Н. Изменение свойств алмаза из ^{13}C при изотермическом сжатии // Журнал Технической Физики. – 2019. – Т. 89, № 6. – С. 888 – 892. DOI_R: 10.21883/JTF.2019.06.47635.2293 (ВАК, номер в Перечне российских журналов МБД_03.08.2018 – 505)

Доклады и тезисы докладов в трудах конференций, симпозиумов и др.

28. Магомедов М.Н. Об аморфной структуре однокомпонентного металла // VIII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – Россия, г. Москва, 19 – 22 ноября 2019 г. / Сборник материалов. – М.: ИМЕТ РАН, 2019. – 860 с. (С. 726 – 728.) ISBN 978-5-4465-2550-8 **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**
29. Aliverdiev A., Batani D., Benocci R., Dezulian R., Amirova A., Krousky E., Pfeifer M., Skala J., Dudzak R., Jakubowska K. Some Peculiarities of Laser Shocks Propagation in Foam-Solid Targets // Contributions of International Conference on Research and Applications of Plasmas (Plasma 2019), Opole, Poland, July 15-19, 2019, O3.1, P. 44. **Устный доклад (А.А. Аливердиев).**
30. Аливердиев А.А., Батани Д.Д. О роли моделировании в эксперименте по изучению экстремальных состояний вещества на примере углерода // Материалы Международной научно-практическая конференции «Компьютерные технологии и моделирование в экономике, образовании, управлении и технике: тенденции и развитие», Махачкала,2019, 3 стр. **Устный доклад (А.А. Аливердиев). Участие в Оргкомитете (А.А. Аливердиев).**
31. Omarov O.A., Omarova N.O., Omarova P.Kh., and Aliverdiev A.A. High-pressure gases breakdown in strong longitudinal magnetic fields // Proc. of 47th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Milan, Italy, July 8-14, 2019, http://ocs.ciemat.es/EPS2019ABS/pdf/P2.3005.pdf **Стендовый доклад (А.А. Аливердиев).**
32. Emirov S.N., Magomedov Ya.M., Amirova A.A., Aliverdiev A.A., Analysis of the experimental temperature-baric dependences of the thermoelectric properties of semiconductors // Abstracts of International Conference on modern concepts and new materials for thermoelectricity, 11 - 15 March 2019, ICTP, Trieste, Italy, P. 3, http://indico.ictp.it/event/8646/session/36/contribution/82/material/2/0.pdf **Стендовый доклад (А.А. Аливердиев).**

33. Alisultanov Z.Z., Ragimkhanov G.B., Khalikova Z.R., and Aliverdiev A.A. Conductivity And Thermoelectric Effect In Electron Gas With Fractal Structure // Abstracts of International Conference on modern concepts and new materials for thermoelectricity, 11 - 15 March 2019, ICTP, Trieste, Italy, P. 4, http://indico.ictp.it/event/8646/session/36/contribution/82/material/2/0.pdf **Стендовый доклад (А.А. Аливердиев).**
34. Эмиров С.Н., Аливердиев А.А., Бейбалаев В.Д., Амирова А.А., Алиев Р.М., Давудов И.А., К описанию температурно-барической зависимости теплопроводности естественных и искусственных композитных материалов // Материалы Международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах», 15-20 сентября 2019 г., Махачкала, Д3-12, С. 433-435. ISBN 978-5-00128-284-6 **Стендовый доклад (А.А. Аливердиев).**
35. Аливердиев А.А., Омаров О.А., Омарова Н.О., Омарова П.Х. Формирование магнитной ловушки при пробое газов высокого давления в сильных магнитных полях // Тезисы XLVI Международной (Звенигородской) конференция по физике плазмы и УТС, 18 – 22 марта 2019 г., http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVI/Pt/ru/JS-Omarov.docx , http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVI/Autorlist.html **Устный доклад (О.А. Омаров).**
36. Эмиров С.Н., Бейбалаев В.Д., Амирова А.А., Давудов И.А., Аливердиев А.А. К описанию температурно-барической зависимости теплопроводности сред с различной упорядоченностью на примере халькогенида мышьяка // Тезисы докладов XIV Международной научно-практической конференции "Новые идеи в науках о Земле" Том IV «Инновационные и цифровые технологии геологической разведки, горного дела, бурения скважин» 2-5 апреля 2019 г. Москва, ISBN 978-5-6040812-4-2 (т. 4), ISBN 978-5-6040812-0-4, С. 506 https://www.mgri-newideas.com/sborniki-dokladov-konferencii **Устный доклад (С.Н. Эмиров).**
37. Магомедов Р.А., Мейланов Р.Р., Ахмедов Э.Н., Бейбалаев В.Д., Аливердиев А.А. К расчету термодинамических характеристик основе фрактального уравнения состояния ксенона и криптона // Материалы XIII Международной научной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы математики и информатики» приуроченная к 55-летию факультета математики и компьютерных наук, Махачкала 2019, С.102-102 **Устный доклад (Р.А. Магомедов). Участие в Оргкомитете (Бейбалаев В.Д., А.А. Аливердиев).**
38. Бейбалаев В.Д., Аливердиев А.А., Ибавов Т.И., Об устойчивости и сходимости разностной схемы для нелокальной задачи неизотермической фильтрации //

Материалы XIII Международной научной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы математики и информатики» приуроченная к 55-летию факультета математики и компьютерных наук, Махачкала 2019, С. 43-44. **Устный доклад (В.Д. Бейбалаев). Участие в Оргкомитете (В.Д. Бейбалаев, А.А. Аливердиев).**

39. Аливердиев А.А., Бейбалаев В.Д., Эмиров С.Н., О температурной закономерности изменения теплопроводности и теплоемкости гранита // Математическое моделирование и краевые задачи, Материалы XI Всероссийской научной конференции с международным участием: в 2х томах Том. 1, Самара 2019, С. 200-202. ISBN: 978-5-7964-2175-8 **Стендовый доклад (В.Д. Бейбалаев).**
40. Ахмедов Э.Н., Решёточные свойства золота при высоких давлениях // Необратимые процессы в природе и технике Труды Десятой Всероссийской конференции. Москва, 29-31 января 2019 г. В 3-х частях. Москва МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2019. С. 122-125. **Устный доклад (Э.Н. Ахмедов).**
41. Ахмедов Э.Н., Размерные зависимости температур плавления и кристаллизации золота в изобарических условиях // В сборнике: Необратимые процессы в природе и технике Труды Десятой Всероссийской конференции. Москва, 29-31 января 2019 г. В 3-х частях. Москва МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2019. С. 142-145. **Устный доклад (Э.Н. Ахмедов).**
42. Крамынин С.П., Ахмедов Э.Н., Изменение свойств ниобия с ростом давления // В сборнике: Необратимые процессы в природе и технике Труды Десятой Всероссийской конференции. Москва, 29-31 января 2019 г. В 3-х частях. Москва МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2019. С. 146-149. **Устный доклад (Э.Н. Ахмедов).**
43. Магомедов М.Н. Изменение барических свойств при уменьшении размера нанокристалла // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Десятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 29 – 31 января 2019 г. (В трех частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – 292 с. (С. 106 – 109.) ISBN 978-5-7038-5084-8 **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**
44. Магомедов М.Н. О размере нанокристалла, в котором возникает необратимый процесс // «Необратимые процессы в природе и технике»: труды Десятой Всероссийской конференции. – Россия, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 29 – 31 января 2019 г. (В трех частях) Ч. I. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2019. – 292 с. (С. 110 – 113.) ISBN 978-5-7038-5084-8 **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**
45. Магомедов М.Н. Изменение решеточных свойств при уменьшении размера нанокристалла бинарного состава // IX Международная научная конференция

«Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, г. Тверь, 20 – 24 мая 2019 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2019. – 399 с. (С. 197 – 198.) ISBN 978-5-7609-1440-8 **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**

46. Магомедов М.Н. Вычисление температуры Дебая для аморфных фаз простого вещества // IX Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов / под ред. Орлова Ю.Д. – Россия, г. Тверь, 20 – 24 мая 2019 г. – Тверь: Изд-во Тверского государственного университета, 2019. – 399 с. (С. 199 – 200.) ISBN 978-5-7609-1440-8 **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**
47. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств при изобарическом уменьшении размера нанокристалла // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 6 томах. Т. 1: Тезисы докладов. – Россия, г. Санкт-Петербург, 9 – 13 сентября 2019. – Санкт-Петербург: Изд-во ООО «Месол», 2019. – 496 с. (С. 82.) Magomedov M.N. Change in thermodynamic properties with isobaric reduction of nanocrystal size // XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. In six book. Book 1: Abstracts. – Saint Petersburg, 9 – 13 September 2019. – 476 p. (P. 79.) ISBN 978-5-6043248-4-4 **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**
48. Магомедов М.Н. Вычисление температуры Дебая для аморфных металлов // XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 6 томах. Т. 3: Тезисы докладов. – Россия, г. Санкт-Петербург, 9 – 13 сентября 2019. – Санкт-Петербург: Изд-во ООО «Месол», 2019. – 472 с. (С. 79.) Magomedov M.N. Debye temperature calculation for amorphous metals // XXI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. In six book. Book 3: Abstracts. – Saint Petersburg, 9 – 13 September 2019. – 472 p. (P. 77.) ISBN 978-5-6043248-4-4 **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**
49. Магомедов М.Н. О температуре плавления различных фаз железа в условиях ядра Земли // «Глубинное строение, геодинамика, тепловое поле Земли, интерпретация геофизических полей». Десятые научные чтения памяти Ю.П. Булашевича: Материалы всероссийской конференции с международным участием. – Россия, г. Екатеринбург. 23 – 27 сентября 2019 г. – Екатеринбург: Изд-во ИГФ УрО РАН, 2019. – 318 с. (С. 165 – 170.) **Устный доклад (М.Н. Магомедов)**
50. Эмиров С.Н., Аливердиев А.А., Бейбалаев В.Д., Амирова А.А., Давудов И.А. О температурно-барических зависимостях эффективной теплопроводности гранитов // 22-й Международный междисциплинарный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-22). Труды симпозиума. – Россия, г. Ростов-на-Дону – пос. Шепси, 9 – 14 сентября 2019 г. – Ростов-на-Дону: Изд-во Фонд науки и образования, 2019. –

Выпуск 22. – Том 1. – 216 с. (С. 176 – 179.) ISBN 978-5-907125-95-7 **Устный доклад (С.Н. Эмиров)**

51. Ахмедов Э.Н. Барические свойства замещения молибден-вольфрам // 22-й Международный междисциплинарный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-22). Труды симпозиума. – Россия, г. Ростов-на-Дону – пос. Шепси, 9 – 14 сентября 2019 г. – Ростов-на-Дону: Изд-во Фонд науки и образования, 2019. – Выпуск 22. – Том 1. – 216 с. (С. 19 - 22) ISBN 978-5-907125-95-7
52. Крамынин С.П., Ахмедов Э.Н. Барические зависимости для кристаллов ниобия // 22-й Международный междисциплинарный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-22). Труды симпозиума. – Россия, г. Ростов-на-Дону – пос. Шепси, 9 – 14 сентября 2019 г. – Ростов-на-Дону: Изд-во Фонд науки и образования, 2019. – Выпуск 22. – Том 1. – 216 с. (С. 99 – 102) ISBN 978-5-907125-95-7
53. Магомедов М.Н. Изменение термодинамических свойств твердого раствора Si-Ge при изобарическом уменьшении размера нанокристалла // «Микро- и нанотехнологии в электронике»: Материалы XI Международной научно-технической конференции. – Россия, пос. Эльбрус, 3 − 8 июня 2019 г. – Нальчик: Изд-во Кабардино-Балкарского государственного университета, 2019. – 624 с. (С. 89 – 93.) ISBN 978-5-93681-164-7
54. Магомедов М.Н. Изменение температуры Дебая при аморфизации металла // 22-й Международный междисциплинарный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-22). Труды симпозиума. – Россия, г. Ростов-на-Дону – пос. Шепси, 9 – 14 сентября 2019 г. – Ростов-на-Дону: Изд-во Фонд науки и образования, 2019. – Выпуск 22. – Том 1. – 216 с. (С. 110 – 113.) ISBN 978-5-907125-95-7
55. Ахмедов Э.Н., Кармоков А.М. Зависимость свойств нанокристалла золота от размера и формы поверхности // В сборнике: Микро- и нанотехнологии в электронике, Материалы XI Международной научно-технической конференции. 2019. С. 159-164.
56. Крамынин С.П., Ахмедов Э.Н. Изучение размерной зависимости температуры плавления ниобия при различных давлениях // В сборнике: Микро- и нанотехнологии в электронике, Материалы XI Международной научно-технической конференции. 2019. С. 361-365.

Монографии, учебники, справочники и др.

57. Бейбалаев В.Д. (ред.), Якубов А.З. (ред.), Магомедов А.М. (отв. ред.) Фундаментальные и прикладные проблемы математики и информатики (Материалы XIII Международной конференции, приуроченной к 55-летию факультета математики и компьютерных наук, 2019), 2019, 230 с. (eLIBRARY ID: 40099106)