

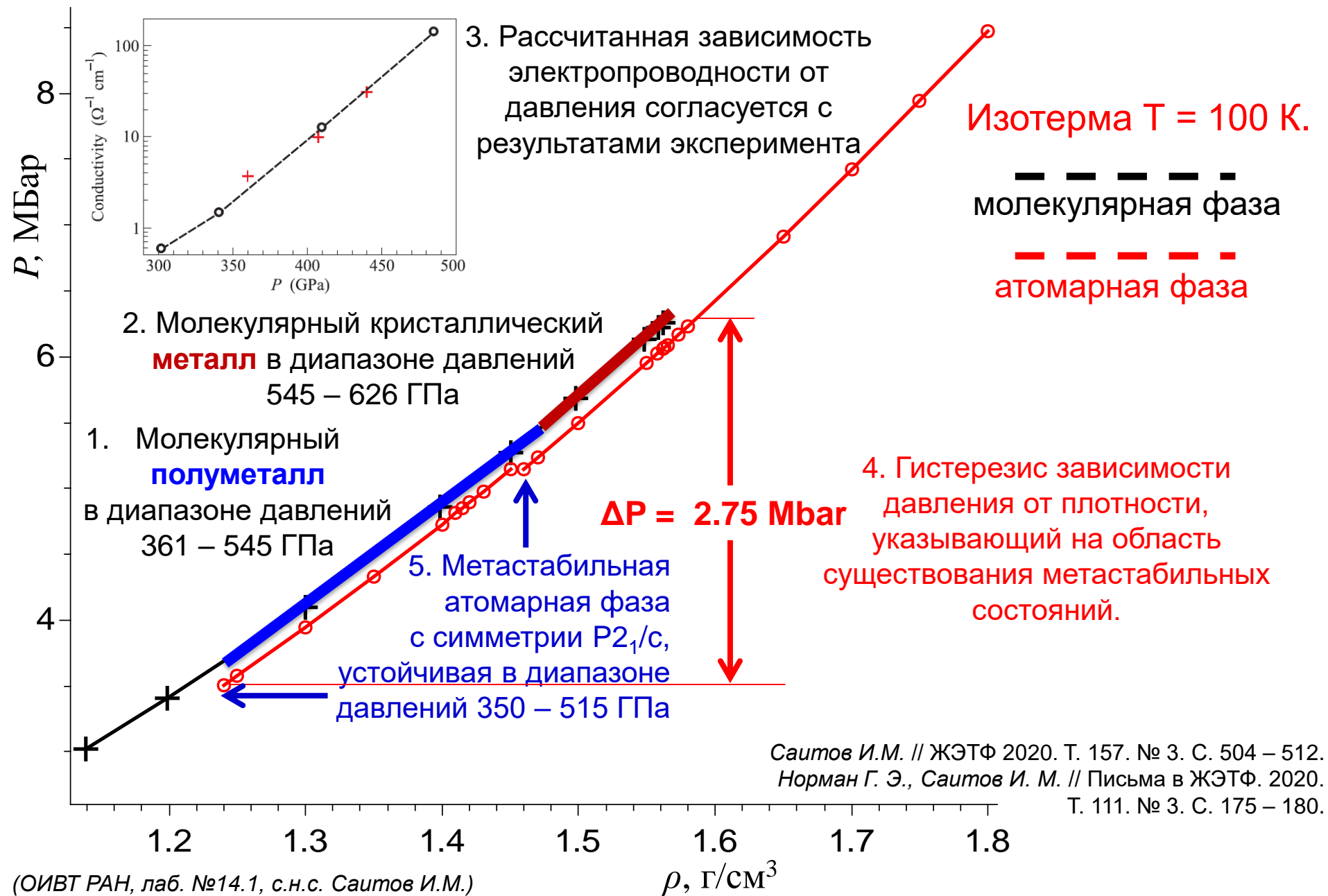


Основные научные достижения ОИВТ РАН в 2020 году

Лаборатории
№14.1, 14.2, 15.1, 15.2, 16

Докладывает
зам. директора по научной работе
к.ф.-м.н. Тимофеев Алексей Владимирович

Полуметаллические и металлические состояния кристаллического водорода, включая метастабильные состояния при высоких давлениях



Саитов И.М. // ЖЭТФ 2020. Т. 157. № 3. С. 504 – 512.
 Норман Г. Э., Саитов И. М. // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111. № 3. С. 175 – 180.

Диффузия нанополостей в твердых телах

Мотивация:

Расчет транспорта газовых продуктов деления в реакторном топливе и конструкционных материалах

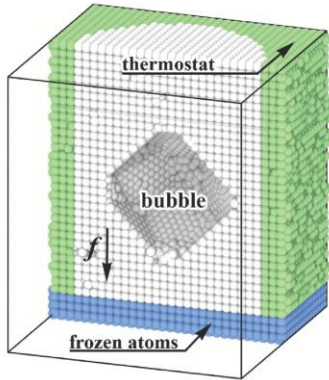
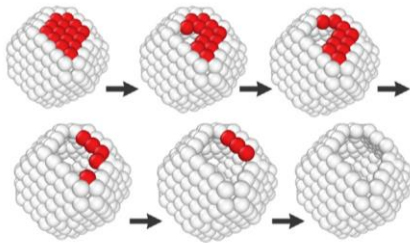
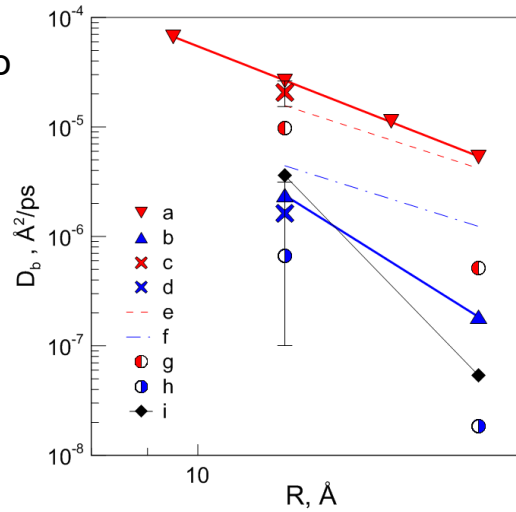


Схема ускоренного метода МД моделирования диффузии: приложение внешней силы к атомам материала уменьшает энергию формирования террас в одном направлении и увеличивает в другом.



Terrace nucleation mechanism ($R = 12 \text{ \AA}$)

Механизм диффузии полости через нуклеацию террас



Зависимость коэффициента диффузии нанополостей в алюминии от радиуса полости
a/b — моделирование ускоренным методом для 900/800 K

c/d — моделирование свободной диффузии для 900/800 K

e/f — предсказание по континуальной теории для 900/800 K

g/h — предсказание по скорректированной теории Бира для 900/800 K

i — нормированные на нулевую концентрацию газа экспериментальные данные

Приложения:

Усовершенствование моделей движения газообразных продуктов деления — гелия и ксенона — в реакторных материалах

Результаты:

- Подтверждена ключевая роль механизма образования террас для нанопузырей в ГЦК алюминии
- Уточнена теория Бира о свободной энергии образования террасы, в которую добавлена конфигурационная энтропия состояния с критической террасой. Оценка коэффициента диффузии по уточненной теории предсказывает полученную в моделировании зависимость от радиуса и температуры, а также абсолютные значения по порядку величины.
- Получена зависимость от концентрации газа, которая оказалась нелинейной. Такая нелинейная зависимость адекватно согласуется с экспериментальными данными при экстраполяции. Опубликованы работы Antropov A.S., Stegailov V.V. / J. Nuclear Materials, (2020) **533**, 152110 (Q1 WoS) Антропов А.С. / Письма в ЖЭТФ (2020) **112**, 325 – 331 (Q3 WoS, Q2 Scopus)

Коэффициенты переноса углеводов при высоких давлениях

Мотивация:

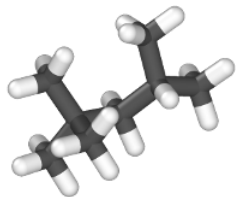
Углеводороды – основные компоненты горюче-смазочных материалов
Коэффициенты переноса определяют эффективность смазывания, нагрузки на механические узлы

Задачи:

- Рассчитать вязкость углеводородов
- Предложить *малозатратный* способ предсказания вязкости методом молекулярной динамики
- Проанализировать вязкость смесей

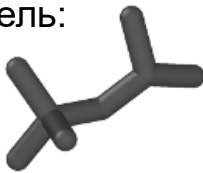
Модели:

Полноатомные:
COMPASS
OPLS-AA

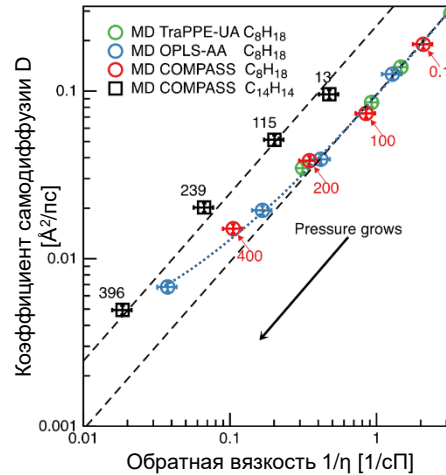


(схема молекулы изооктана C_8H_{18} в полноатомной модели)

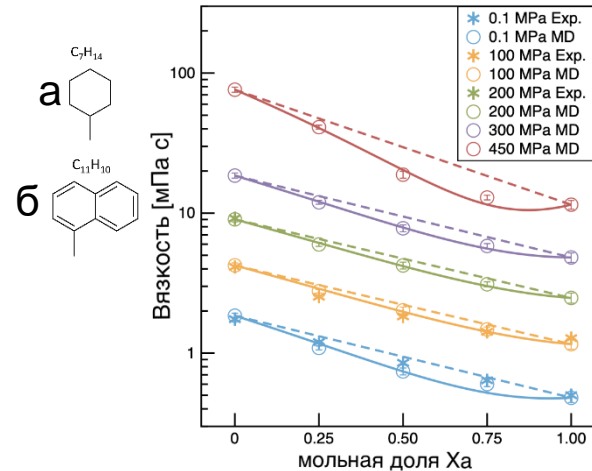
Огрубленная модель:
TraPPE-UA



(схема молекулы изооктана C_8H_{18} в огрубленной модели)



Зависимость между коэффициентами вязкости и самодиффузии. Для изооктана C_8H_{18} три модели ложатся на одну универсальную зависимость (синяя пунктирная линия)



Вязкость смесей метилциклогексана (а) и метилнафталина (б). Прямые штриховые линии – вязкость для идеального раствора, сплошные линии – аппроксимация с введением неидеальности по закону Грюнберга-Ниссана

Приложения:

поведение топливных и смазочных материалов при давлениях, характерных для дизельных двигателей и трансмиссионных узлов

Результаты:

- Показана универсальная зависимость между коэффициентами вязкости и самодиффузии, не зависящая от детализации атомистической модели
- Универсальность этой зависимости позволяет перенести результат, полученный в упрощенной модели, на свойства реального вещества
- Рассчитана вязкость смесей углеводородов, продемонстрирован рост неидеальности смеси с давлением

Опубликованы работы

N.D. Kondratyuk, D.Yu.Lenev, V.V. Pisarev / J. Chem. Phys. (2020) **152**, 191104

N.D. Kondratyuk, V.V. Pisarev, J.Ewen / J. Chem. Phys.(2020) **153**, 154502 (Q2 WoS, Q1 Scopus)

Зарождение углеродных наночастиц из пересыщенного пара

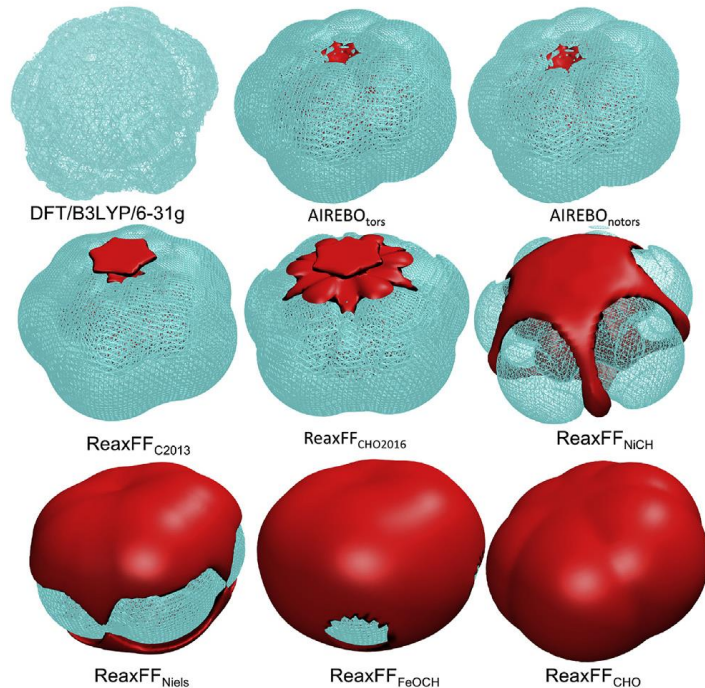


Рисунок 1. Эквипотенциальные поверхности 0,1 эВ (бирюзовый) и 0,2 эВ (красный) взаимодействия атома С с кластером С₆.

Опубликовано: N Orekhov, G Ostroumova, V Stegailov High temperature pure carbon nanoparticle formation: Validation of AIREBO and ReaxFF reactive molecular dynamics. **Carbon** 170, 606-620.

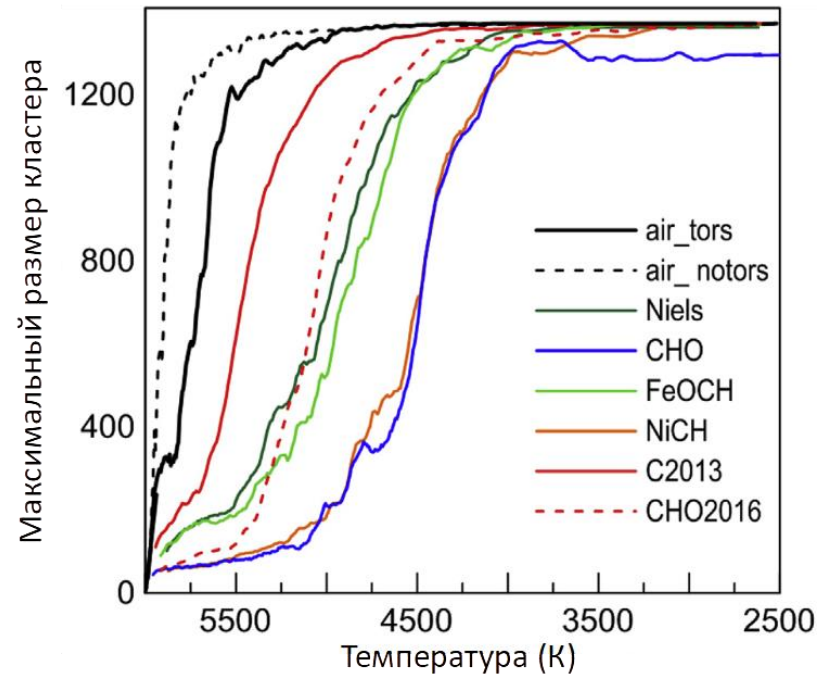
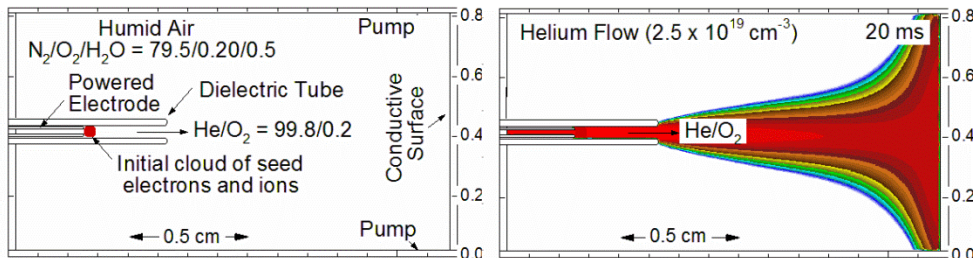


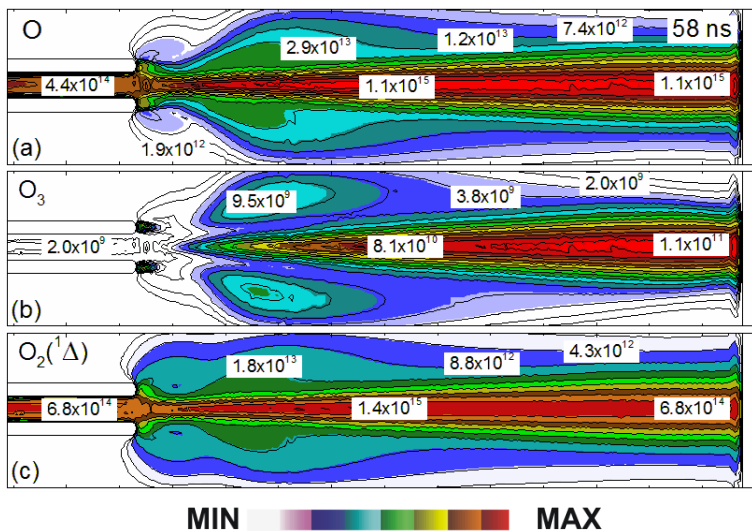
Рисунок 2. Зависимость максимального размера кластера в рассматриваемых моделях от температуры при охлаждении пара

Потоки активных частиц к диэлектрическим поверхностям при многократном отражении от них ионизационных волн (ИВ), создаваемых плазменными струями

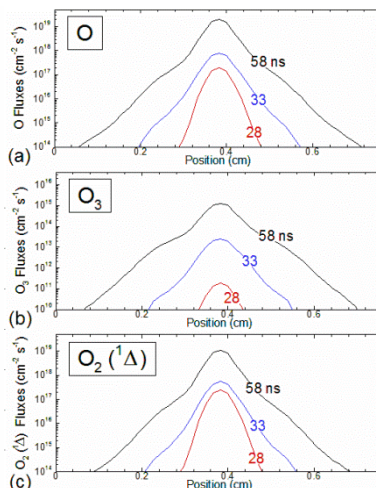
Геометрия расчетной области и установившийся поток гелия в окружающий влажный воздух



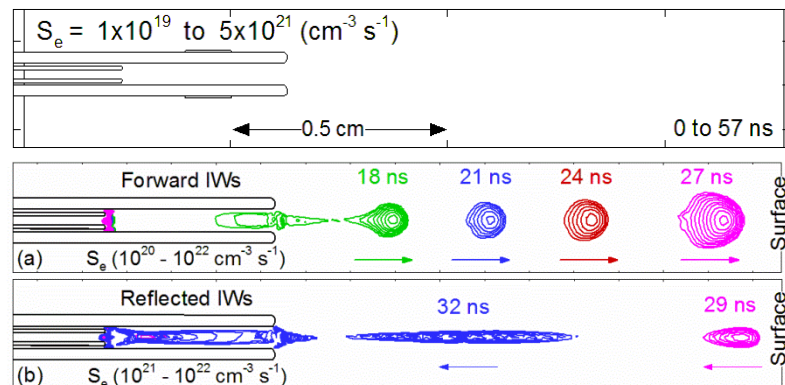
Плотность радикалов O, O₃ и O₂^(1Δ) после прохождения прямой, отраженной и вторичной прямой ИВ.



Потоки O, O₃ и O₂^(1Δ) на поверхность



Отражение ИВ (плазменной пули) от поверхности проводящего диэлектрика



Поверхность диэлектрика

✓ N. Yu. Babaeva and G. V. Naidis, “Reactive Fluxes Delivered by Plasma Jets to Conductive Surfaces During Multiple Reflections of Ionization Waves”, *J. Appl. Phys.* (2020).

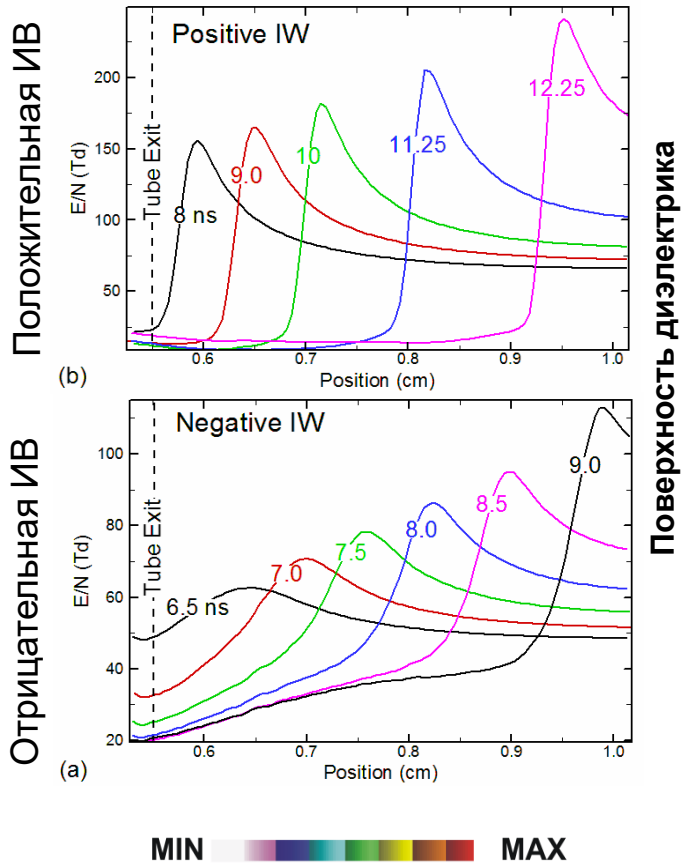
<https://doi.org/10.1063/5.0019350>

✓ Данная статья была отобрана, как **Featured Article** журнала *Journal of Applied Physics*:

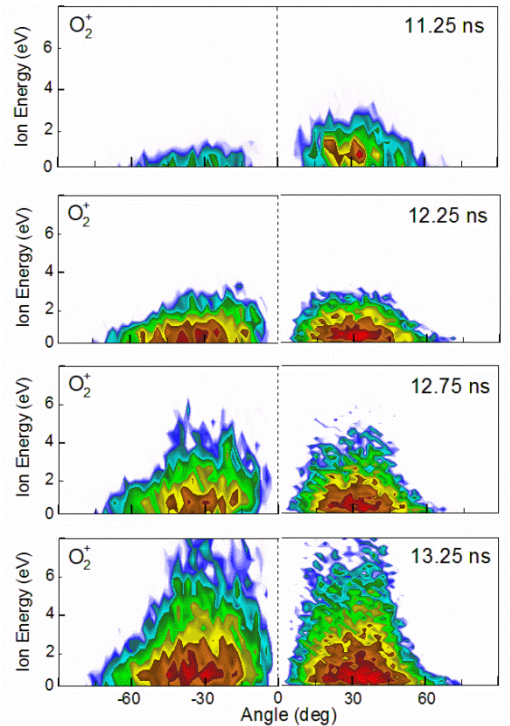
<https://publishing.aip.org/publications/latest-content/understanding-the-utility-of-plasmas-for-medical-applications/>

Распределение ионов по энергиям (ФРИЭ) при взаимодействии положительных и отрицательных ионизационных волн (ИВ) с плоскими диэлектрическими поверхностями

Электрическое поле на оси ИВ при ее приближении к диэлектрику

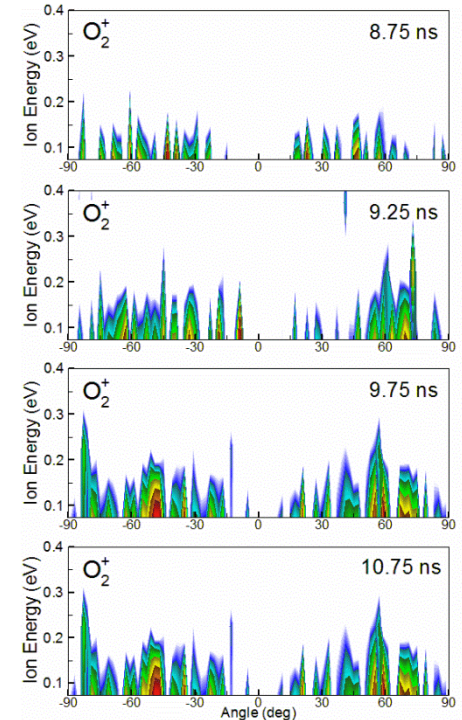


ФРИЭ ионов O_2^+ на поверхности для положительной ИВ



ИВ положительной полярности могут создавать у поверхности диэлектрика ионы с энергией в несколько эВ.

ФРИЭ ионов O_2^+ на поверхности для отрицательной ИВ



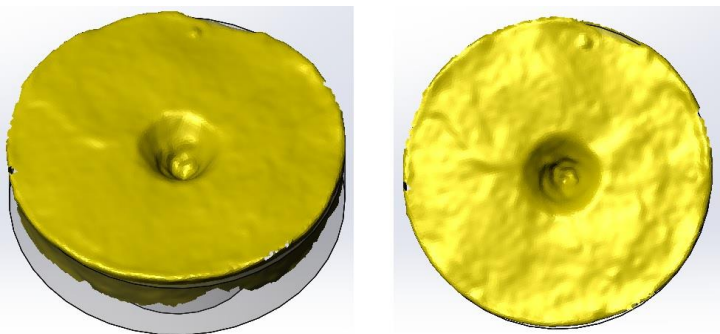
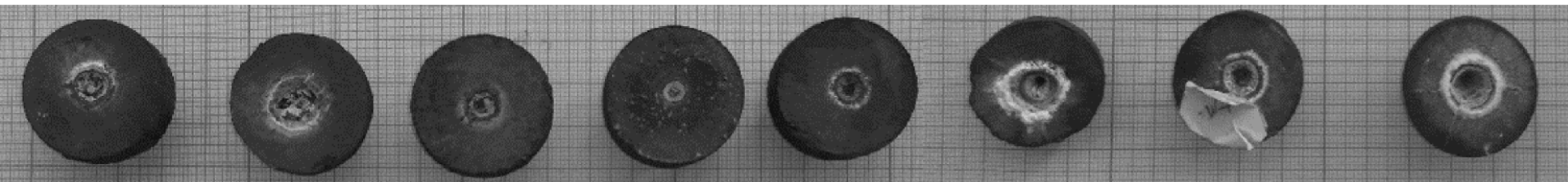
В случае отрицательной полярности ИВ ионы почти термализованы.

✓ N. Yu. Babaeva and G. V. Naidis, "Ion Energies Delivered by Negative and Positive Ionization Waves to Flat Dielectric Surfaces", *Plasma Sources Sci. Technol.* **29** (2020) 095020

(Лаб. №15.1 ОИВТ РАН, с.н.с. Бабаева Н.Ю., г.н.с. Найдис Г.В.)

Испытания на жаропрочность высокотемпературных композиционных материалов посредством лазерного нагрева в сверхзвуковом потоке

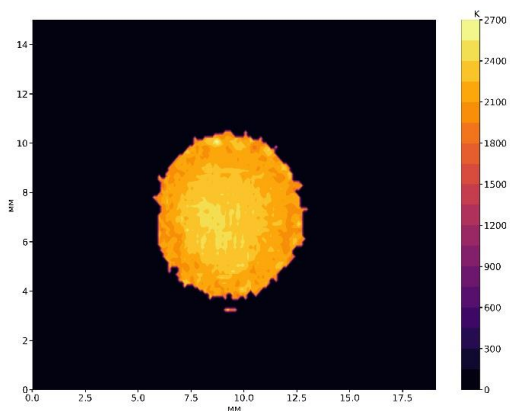
1 2 3 4 5 6 7 8



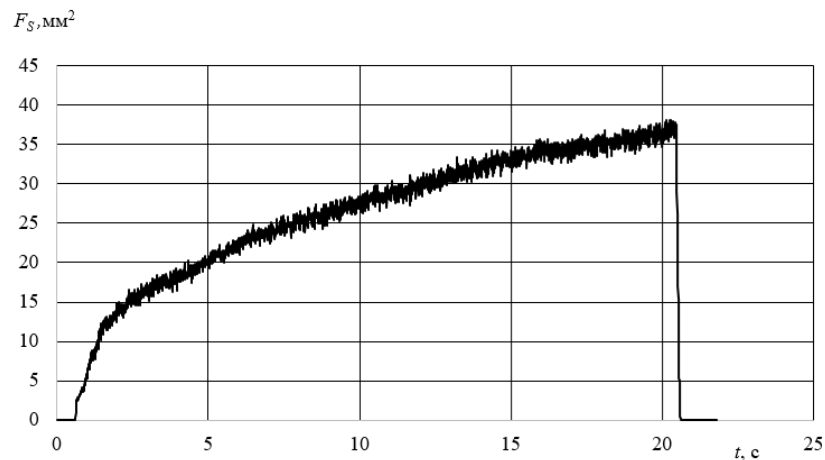
№	ρ , г/см ³	M_0 , г	Добавки
1	2.03	13.75	HfC
2	1.80	9.60	ZrC
3	2.60	15.40	TaC
4	2.02	12.86	-
5	1.89	12.72	HfC + нитевидные кристаллы SiC
6	2.04	7.47	TaC + нитевидные кристаллы SiC
7	2.01	8.34	нитевидные кристаллы SiC
8	2.00	8.44	ZrO ₂ + нитевидные кристаллы SiC

Результат 3D-сканирования поверхности

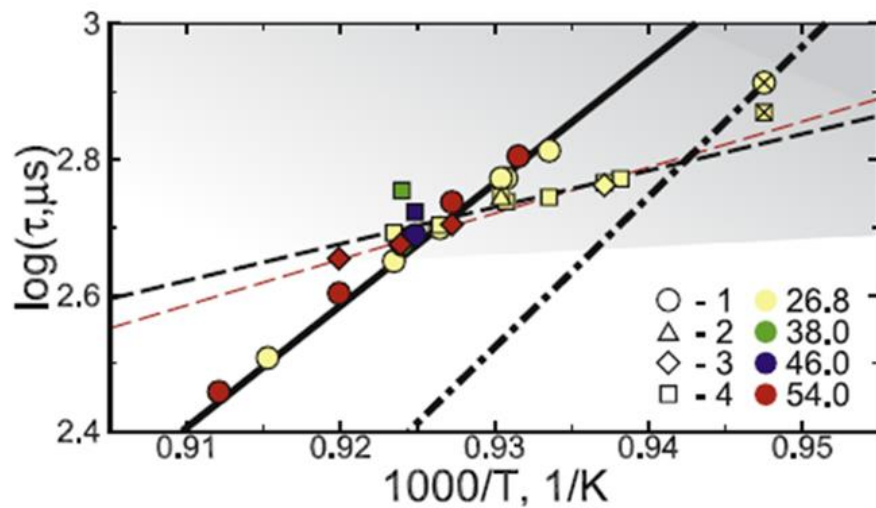
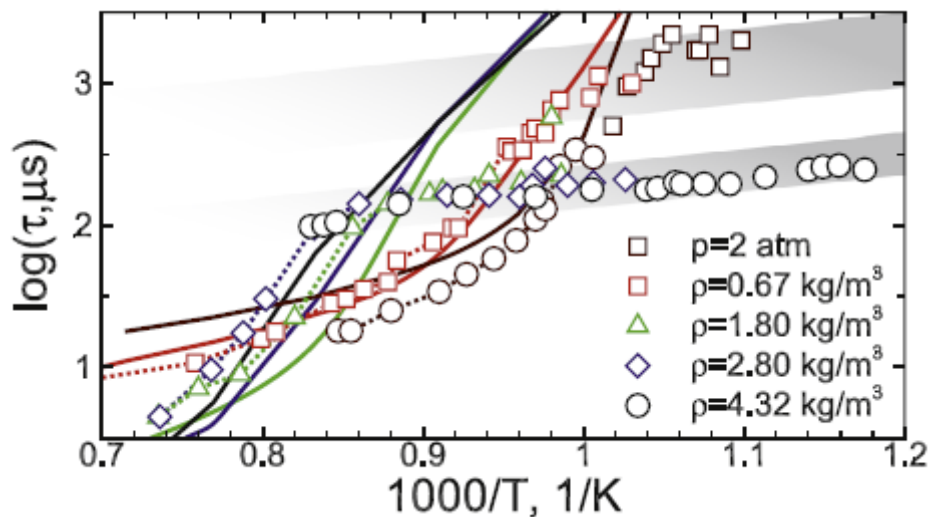
Состав используемых модельных образцов



Фотография
теплового пятна
(слева) и
временная
зависимость его
площади (справа)



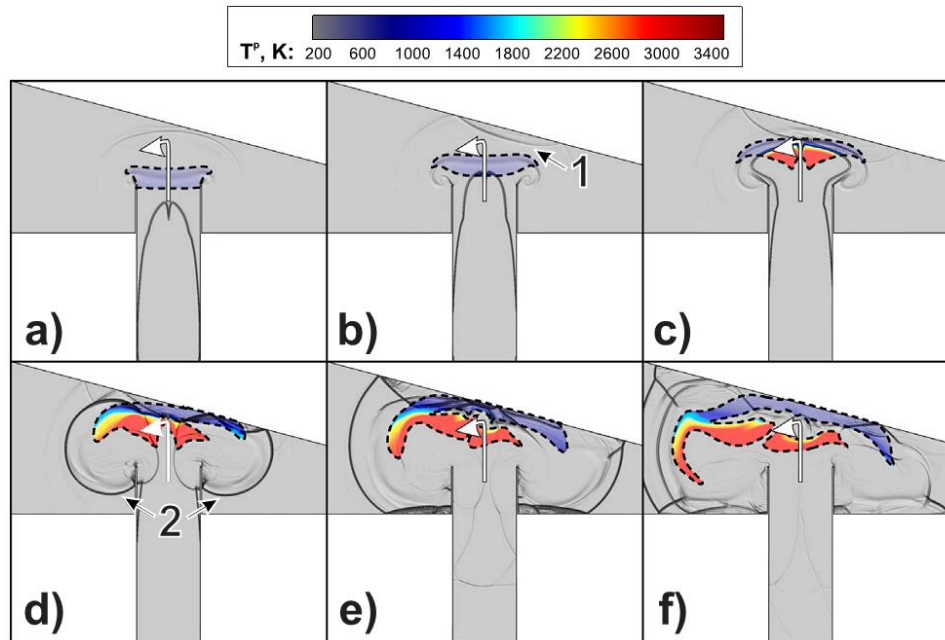
Природа и классификация очагового воспламенения в ударных трубах



Зависимость времени задержки воспламенения водородно-воздушных смесей от температуры. Слева – обзор экспериментальных данных при различных давлениях (плотностях). Справа – расчетные точки при фиксированной плотности за отраженной ударной волной, 1 – жесткое воспламенение у торца ударной трубы, 2 – воспламенение в пограничном слое, 3 – воспламенение в зоне рециркуляции, 4 – воспламенение на оси трубы. Сплошная и штрих-пунктирная – предсказания согласно идеальной теории ударной трубы для двух кинетических механизмов. Расчеты представлены для различных диаметров труб (цвет, диаметр в мм) и для двух кинетических механизмов (сплошные и перечеркнутые значки). Закрашенная область справа соответствует одной из характерных областей, отмеченных на рисунке слева.

Kiverin A.D., Minaev K.O., Yakovenko I.S. Modes of mild ignition in shock tubes: Origins and classification.// Combustion and Flame. V. 221, pp. 420-428 doi: 10.1016/j.combustflame.2020.08.013

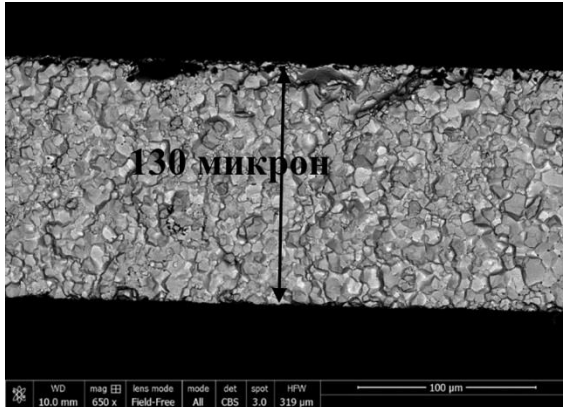
Напыление конденсированных микрочастиц под действием ускоряющегося пламени



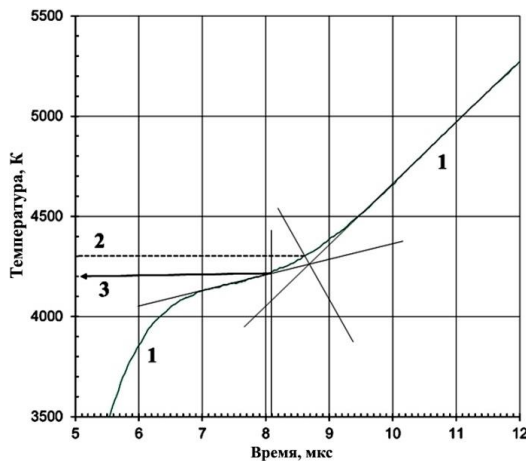
Структура газодинамического течения, формируемого в процессе напыления микрочастиц в подложку ускоряющимся пламенем. Угол наклона подложки по отношению к оси канала – 15° . Траектория центра масс облака частиц показана белой стрелкой. Штриховая черная линия ограничивает область пространства с массовой плотностью частиц $\rho_p > 0.005$ кг/м³. Цветом представлено распределение температуры частиц в облаке. а) $t = 170$ мкс б) $t = 185$ мкс (1 – отраженная ударная волна) в) $t = 200$ мкс д) $t = 215$ мкс (2 – вторичная ударная волна, возникающая в результате перехода горения в детонацию в зазоре между подложкой и соплом) е) $t = 230$ мкс ф) $t = 245$ мкс.

Yakovenko I.S., Kiverin A.D. Micro-particles spraying via non-stationary flame acceleration process.// Acta Astronautica (Published online) doi: 10.1016/j.actaastro.2020.10.044

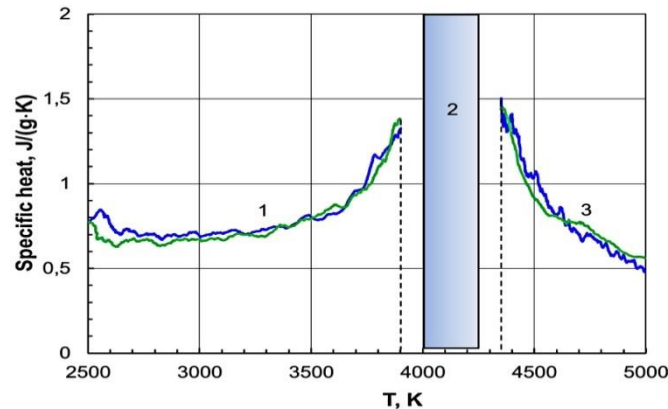
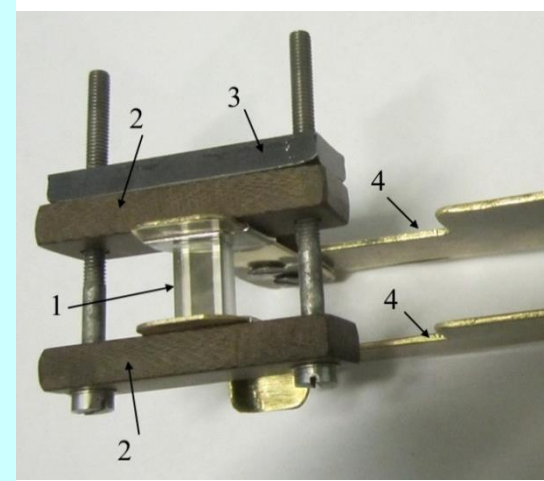
Теплоемкость тугоплавкого карбида гафния вблизи температуры плавления



Внешний вид образца карбида гафния (на изломе). Толщина образца ~ 130 μm (кристаллиты – до 15-20 микрон)



→
Образец карбида гафния, зажатый между двумя пластинами кварцевого стекла (1), закрепленными в подводящих электродах (4).
 1 – пластинка карбида, зажатая между пластинами кварцевого стекла (диаметр излучающего пятна около 1.5 мм)
 2 – Изолирующие пластины;
 3 – Металлическая пластина;
 4 – Подводящие электроды (латунь).



$$T_{\text{sol}} = 4000 \pm 50 \text{ K}$$

$$T_{\text{liq}} = 4200 \pm 50 \text{ K}$$

Удельная **теплоемкость** HfC от температуры вблизи фазового перехода. 1 – твердая фаза; 2 – плавление; 3 – жидкая фаза.