

3-Молекулярная физика, физика жидкостей и газов

Агафонов Иван Николаевич, 1 курс
МГУ, физический

Измерение вязкости жидкостей по затуханию колебаний камертона

Научный руководитель: Пятаков Александр Павлович, аспирант, физический МГУ
Адрес: 117465, ул. Тёплый Стан, д 15/1, кв. 114
Телефон: (095) 338-92-21
E-Mail: web_master@perevodi.ru стр. 317

Андбаева Валентина Николаевна, 4 курс
Уральский Государственный Университет, физический

Поверхностное натяжение криогенных растворов азот - кислород и азот - гелий

Научный руководитель: Каверин Алексей Михайлович, к. ф.-м. н, старший научный сотрудник, доцент,
Институт теплофизики УрО РАН, Уральский Государственный Университет
Адрес: 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 106. Институт теплофизики УрО РАН. Каверину А.М.
Телефон: (3432) 67-88-09
E-Mail: kav@itp.uran.ru стр. 319

Балханов Василий Карлович, аспирант
Отдел физических проблем Бурятского научного центра Сибирского отделения РАН, отдел физических проблем

Масштабная инвариантность геоэлектрических параметров

Научный руководитель: Башкуев Юрий Буддич, д.т.н., проф., зав. лаб, БНЦ СО РАН
Адрес: 670047 Улан-Удэ ул. Сахьяновой, 8
Телефон: (3012)43-32-10
E-Mail: lab@rgp.bsc.buryatia.ru стр. 882

Балханов Василий Карлович, аспирант
Отдел физических проблем Бурятского научного центра Сибирского отделения РАН, отдел физических проблем

Спектральная характеристика импеданса

Научный руководитель: Башкуев Юрий Буддич, д.т.н., проф., зав. лаб, БНЦ СО РАН
Адрес: 670047 Улан-Удэ ул. Сахьяновой, 8
Телефон: (3012)43-32-10
E-Mail: lab@rgp.bsc.buryatia.ru стр. 884

Белик Виталий Валентинович, 6 курс
МГУ им. М.В. Ломоносова, физический

Неизотропный шум при броуновском движении

Научный руководитель: Чичигина Ольга Александровна, к. ф.-м. н, старший научный сотрудник,
физический МГУ им. М.В. Ломоносова
Адрес: 129226, Москва, Сельскохозяйственная ул. 13-2-30
Телефон: (095)181-63-03
E-Mail: vitae2001@pochtamt.ru стр. 321

Богатищева Наталья Сергеевна, аспирант
Институт теплофизики УрО РАН, -

Использование метода функциональной автомодельности для описания критических свойств веществ

Адрес: 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106, ИТФ УрО РАН
Телефон: (3432)67-88-11
E-Mail: n_bogatishcheva@itp.uran.ru стр. 323

Бондарев Виталий Сергеевич, м. н. с.
Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, физический

Исследования термодинамических свойств керамики $Ba_{0.92}Ca_{0.08}Ti_{0.76}Zr_{0.24}O_3$

Научный руководитель: Флёров Игорь Николаевич, д. ф.-м. н, Руководитель теплофизической группы кристаллофизик, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН
Адрес: 660017 г. Красноярск ул. Урицкого 125 кв 61
Телефон: (3912) 49-45-07
E-Mail: vbondarev@yandex.ru стр. 149

Волков Николай Александрович, аспирант
Санкт-Петербургский Государственный Университет, физический
Энтропическое моделирование полимерных цепей с использованием алгоритма Ванга-Ландау
Научный руководитель: Воронцов-Вельяминов Павел Николаевич, д. ф.-м. н, профессор кафедры молекулярной биофизики, физический Санкт-Петербургского Государственного Университета
Адрес: 198205 Россия, Санкт-Петербург, ул. Партизана Германа д.12, кв.318
Телефон: (812)136-08-17
E-Mail: wolfmail@yandex.ru стр. 325

Гугин Павел Павлович, 2 курс
НГУ, физический
Уменьшение погрешности измерений вязкости методом Спюкса с использованием оптического метода регистрации
Научный руководитель: Золкин Александр Степанович, к. ф.-м. н, доцент кафедры общей физики, Новосибирский Государственный университет
Адрес: НСО, 630090, Пирогова 14-311
Телефон: (3832)39-78-74
E-Mail: anaumynau@mail.ru стр. 326

Давлетбаев Альфред Ядгарович, 4 курс
Башкирский Государственный Университет, физический
Математическое моделирование распределения тепла в многослойной среде
Научный руководитель: Ковалева Лиана Ароновна, доктор технических наук, профессор, кафедра прикладной физики БашГУ
Адрес: 450074, Уфа, Гоголя 11-403
Телефон: (3472)23-67-62
E-Mail: DavletbaevAY@rambler.ru стр. 328

Дамдинов Баир Батуевич, с. н. с.
Бурятский научный центр СО РАН, Отдел физических проблем
Исследование вязкоупругих материалов резонансным методом
Адрес: 670047 г.Улан-Удэ ул. Сахьяновой, 6
Телефон: (3012) 43-22-82
E-Mail: dababa@mail.ru стр. 1003

Ершов Иван Николаевич, 6 курс
Новосибирский государственный университет, физический
Вспыгние одиночного снаряда в прямоугольных каналах малого сечения
Научный руководитель: Кузнецов Владимир Васильевич, д. ф.-м. н, заведующий лабораторией, Институт теплофизики СО РАН
Адрес: 630090, Новосибирск, Пирогова-14,505
E-Mail: drug@gorodok.net стр. 330

Ефремов Эдуард Викторович, аспирант
Орловский государственный университет, физико-математический
Особенности нагрева контактирующих сферических частиц с внутренними источниками тепла при значительных перепадах температуры в неоднородном простом газе
Научный руководитель: Дьяконов Сергей Николаевич, без степени, ст. преподаватель, Орловский государственный университет
Адрес: 303900 Орловская область, Урицкий район, п. Нарышкино, ул. Заводская, д. 64, кв. 15
E-Mail: ovschdn@rekom.ru стр. 331

Жуковская Олеся Викторовна, 4 курс
Новосибирский Государственный Университет, физический
Исследование теплообмена в стекающей пленке жидкости
Научный руководитель: Чиннов Евгений Анатольевич, к. ф.-м. н, с.н.с, Институт Теплофизики СО РАН
Адрес: Россия, 630090, Новосибирск-90, Пирогова 18- 218
Телефон: (3832)39-11-37
E-Mail: lesya_z@gorodok.net стр. 332

Зинич Дмитрий Валерьевич, аспирант
Томский государственный университет, Радиофизический
Исследование фазового перехода вода-лед радиофизическим методом
Научный руководитель: Суслев Валентин Иванович, к. ф.-м. н, доцент, Томский государственный университет, радиофизический
Адрес: 634050, г. Томск, пр.Ленина 36, ТГУ, РФФ
Телефон: (3822) 41-39-64
E-Mail: susl@public.tsu.ru стр. 956

Зиновьев Денис Михайлович, аспирант
Тюменский Государственный университет, физический
Определение места утечки слабо сжимаемой жидкости из трубопровода по результатам нестационарных исследований
Научный руководитель: Даниэлян Юрий Саакович, д. ф.-м. н, зам. гл. инженера по науке
Гипротюменнефтегаз, ОАО ГИПРОТЮМЕННЕФТЕГАЗ
Адрес: 625000, г. Тюмень, Ленина 38, каб. 400
Телефон: (3452) 94-87-72
E-Mail: DZinovjew@bk.ru стр. 335

Игошин Дмитрий Евгеньевич, аспирант
СГПИ, физико-математический
Моделирование конвективной сушки каучука
Научный руководитель: Шагапов В.Ш., д. ф.-м. н, зав. кафедрой ПММ, СГПИ
Адрес: 453118, Стерлитамак, ул. Патриотическая 90-61
Телефон: (3473)26-48-69
E-Mail: navydimka@rambler.ru стр. 335

Ильин Владимир Алексеевич, аспирант
ПермГУ, физический
Конвекция идеального диэлектрика в переменном электрическом поле
Научный руководитель: Смородин Б.Л., д. ф.-м. н, профессор, ПермГУ
Адрес: 614077, г. Пермь, ул. Старцева 45-79
E-Mail: ilin1@psu.ru стр. 337

Козлов Александр Алексеевич, аспирант
Пермский государственный университет, физический
О гравитационно-инерционной конвекции
Научный руководитель: Путин Геннадий Федорович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой, профессор,
Пермский государственный университет
Адрес: 614990, Пермь, букирева 15
Телефон: (3422) 39-68-36
E-Mail: a_kozlov@freemail.ru стр. 338

Колотов Андрей Александрович, аспирант
Удмуртский Государственный Университет, физический
Проявление ``эффекта дальнего действия`` при фотонном облучении фольг Ni-Cu
Научный руководитель: Баянкин Владимир Яковлевич, доктор технических наук, заведующий лабораторией, физико-технический институт УрО РАН
Адрес: 426034, г.Ижевск, ул.Университетская, 1, физфак
E-Mail: less@fti.udm.ru стр. 340

Леонтьева Елена Владимировна, 5 курс
Удмуртский Государственный Университет, физический
Температурные аномалии бесконтактно активированных жидкостей
Научный руководитель: Широносков Валентин Георгиевич, к. ф.-м. н, Директор, УНЦ `РТ` УдГУ
Адрес: 426068 г. Ижевск а/я 2727 Широносков В.Г.
Телефон: (3412) 76-34-66
E-Mail: svg@uni.udm.ru стр. 341

Мавлетов Марат Венерович, аспирант
Башкирский Государственный Университет, физический
Фильтрация многокомпонентных систем в пористых средах с учетом адсорбции
Научный руководитель: Ковалева Лиана Ароновна, доктор технических наук, зав. кафедрой, профессор,
БашГУ, кафедра прикладной физики
Адрес: 450078, г. Уфа, ул. Владивостокская 13, кв. 58
Телефон: (3472)23-67-62
E-Mail: codehope@yandex.ru стр. 345

Мавлетов Марат Венерович, аспирант
совместная лаборатория экспериментальной гидродинамики УФ ООО ЦИР ЮКОС и Института
механики УНЦ РАН, физический
Особенности течения высококонцентрированных обратных водонефтяных эмульсий в капиллярах, трещинах и пористых структурах
Научный руководитель: Ахметов Альфир Тимирзянович, к. ф.-м. н, зав. лабораторией, Совместная
лаборатория экспериментальной гидродинамики УФ ООО ЦИР ЮКОС и Института механики УНЦ РАН
Адрес: 450078, г. Уфа, ул. Владивостокская 13, кв. 58
Телефон: (3472)23-67-62
E-Mail: codehope@yandex.ru стр. 343

Малышкин Александр Викторович, 3 курс
Уральский Государственный Университет, физический
Предельные перегревы криогенных растворов азот - кислород и кислород - гелий
Научный руководитель: Каверин Алексей Михайлович, к. ф.-м. н, старший научный сотрудник, доцент,
Институт теплофизики УрО РАН, Уральский Государственный Университет
Адрес: 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 106. Институт теплофизики УрО РАН. Каверину А.М.
Телефон: (3432) 67-88-09
E-Mail: kav@itp.uran.ru стр. 346

Мальханова Ольга Геннадьевна, аспирант
Институт Металлургии УрОРАН, Лаборатория математического моделирования
Влияние выбора псевдопотенциальной модели на точность расчёта структурных факторов Бхатиа-Торнтона
Научный руководитель: Дубинин Николай Эдуардович, к. ф.-м. н, Старший научный сотрудник,
Институт Металлургии УрОРАН
Адрес: 620131 Екатеринбург, Заводская 38-52
Телефон: (3432) 43-90-78
E-Mail: m_o_l_a@mail.ru стр. 348

Митрофанов Василий Владимирович, 6 курс
МГУ им М.В. Ломоносова, физический
Молекулярно-динамическое исследование структуры и свойств воды на основе SP3-модели.
Научный руководитель: Романовский Ю.М., д. ф.-м. н, профессор, МГУ им М.В. Ломоносова,
физический
Адрес: Москва, Воробьевы горы, физический ф-т МГУ, 119992
E-Mail: vasily_mitrofanov@rambler.ru стр. 349

Никифорова Елена Владимировна, магистрант
Тверской государственной университет, физико-технический
Молекулярно-динамическое моделирование самоорганизации наноструктур при взаимодействии малых капель с поверхностью твердого тела

Научный руководитель: Самсонов Владимир Михайлович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой теоретической физики, Тверской государственной университет

Адрес: 170021, г. Тверь, ул. Хрустальная, д. 36, кв. 159

Телефон: (0822) 55-76-27

E-Mail: Vladimir.Samsonov@tversu.ru стр. 351

Оствальд Роман Вячеславович, ассистент
Томский политехнический университет, физико-технический

Равновесие жидкость - пар в системе UF₆ - IF₅ - BrF₃

Научный руководитель: Жерин И.И., к. ф.-м. н, зав. каф. ХТРЭ ФТФ ТПУ, доцент, Томский политехнический университет

Адрес: 634021, г. Томск, ул. О.Кошевого д. 75 кв. 21

Телефон: (83822)41-91-07

E-Mail: trugom@mail2000.ru стр. 353

Рахматуллин Ильдар Раушанович, ассистент
Бирский Государственный Педагогический Институт, физико-математический

Инжекция перегретого пара в пористую среду

Адрес: 452308 респ. Башкортостан Дюртюлинский р-н дер. Иванаево ул. Молодежная д. 9

E-Mail: ildar_bash@rambler.ru стр. 355

Саенко Вячеслав Владимирович, ассистент
Ульяновский государственный университет, физико-технический

Влияние конечной скорости на асимптотическое распределение частиц в процессе аномальной диффузии.

Адрес: 432067, г. Ульяновск, пр. Ульяновский, д.5, кв. 238.

Телефон: (8422) 32-06-12

E-Mail: saenkoslava@mail.ru стр. 356

Сивков Григорий Михайлович, аспирант
УрГПУ, физический

Температурные зависимости плотности расплава Zr-30 ат. % Pd.

Научный руководитель: Попель Петр Станиславович, д. ф.-м. н, профессор, заведующий кафедрой, УрГПУ

Адрес: г. Екатеринбург, пр. Космонавтов 26, 620219

E-Mail: GMSivkov@yandex.ru стр. 1219

Ставцева Ольга Владимировна, 4 курс
Орловский государственный университет, физико-математический

Два касающихся диэлектрических шара во внешнем электрическом поле.

Научный руководитель: Дьяконов Сергей Николаевич, без степени, Ст. преподаватель, Орловский государственный университет

Адрес: 302026 г. Орел, ул. Маяковского, д. 60, кв. 69

Телефон: (0862) 77-71-61

E-Mail: ovschdn@rekom.ru стр. 728

Уткин Андрей Вячеславович, м. н. с.
ИТПМ СО РАН, лаборатория 4

Детализированное исследование параметров детонационной волны в молекулярном кристалле при помощи метода молекулярной динамики.

Научный руководитель: Фомин В.М., Чл.-корр. РАН, Директор ИТПМ СО РАН, ИТПМ СО РАН

Адрес: ул. Институтская 4/1, Новосибирск, 630090, ИТПМ СО РАН

Телефон: (83832) 30-38-04

E-Mail: utkin@itam.nsc.ru стр. 359

Хасанов Марат Камилович, аспирант
СГПИ, физико-математический

Образование газовых гидратов в пористой среде

Научный руководитель: Шагапов В.Ш., д. ф.-м. н, Профессор, СГПИ
Адрес: 453104, Стерлитамак, Лесная 2-4
E-Mail: marat_sgpi@mail.ru стр. 360

Хорошавцева Вероника Юрьевна, 6 курс
Санкт-Петербургский Государственный Университет, физический

Молекулярные свойства дендронизированных полимеров

Научный руководитель: Лезов Андрей Владимирович, д. ф.-м. н, профессор, СПбГУ кафедра физики полимеров
Адрес: СПб пр.Стачек36/2 кв.28 индекс198097
Телефон: (812) 186-60-02
E-Mail: veronikk@mail.ru стр. 361

Ягодин Денис Анатольевич, аспирант

Уральский Государственный Педагогический Университет, физический

Физико-химические свойства сплава Pd-18 ат.%Si в жидком состоянии.

Научный руководитель: Сидоров Валерий Евгеньевич, д. ф.-м. н, профессор, УрГПУ, физический, кафедра общей физики и естествознания
Адрес: г. Екатеринбург, пр. Космонавтов, 26, 620219.
Телефон: (3432) 71-01-90
E-Mail: DYagodin@yandex.ru стр. 362

Янко Виталий Сергеевич, 5 курс

Санкт-Петербургский государственный Университет, физический

Расчет взаимодействия простых молекул с анионами поверхности ионных адсорбентов

Научный руководитель: Цыганенко Алексей Алексеевич, д. ф.-м. н, в. н. сотрудник, Научно-исследовательский институт физики СПбГУ им. Фока
Адрес: 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, д.1
Телефон: (812)428-45-71
E-Mail: refuznik@yandex.ru стр. 364

Измерение вязкости жидкостей по затуханию колебаний камертона

Агафонов Иван Никалевич

Жданов Александр Григорьевич

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

Пятаков Александр Павлович

web_master@perevodi.ru

Введение

Вискозиметры широко применяются во многих отраслях науки и техники для измерения вязкости различных веществ (в основном жидкостей).

В настоящей работе предлагается модель вискозиметра, позволяющая работать в режиме реального времени с жидкостями широкого диапазона вязкостей. Принцип работы прибора основан на измерении затухания звуковых колебаний высокочастотного камертона.

Возможны два режима работы: исследуемая жидкость помещается на поверхность камертона в виде капель [1]; исследуемая жидкость помещается в емкость, куда погружаются зонды, прикрепленные к камертону. Первый режим предназначен для работы с маловязкими жидкостями (например, вода), а второй режим – с более вязкими (например, глицерин).

Отличительной чертой предлагаемой модели является возможность работы с малыми объемами жидкостей (менее 0.1 мл для «капельного» режима и порядка 20 мл для зондового режима). Подобные свойства измерительной системы могут оказаться полезными для целого ряда практических приложений, где существенны ограничения, связанные с количеством исследуемой жидкости [2].

Экспериментальная установка

Физическая идея, лежащая в основе камертонного метода измерения вязкости жидкостей, заключается в определении затухания, вносимого в колебания высокочастотного камертона силой вязкого трения, которая действует на поверхность камертона со стороны капли исследуемой жидкости или на прикрепленный к нему зонд, опущенный в исследуемую жидкость. Независимость показателей вязкости от внешних условий достигается сравнением экспериментально получаемых данных для декрементов затухания колебаний с жидкостью и без нее.

Основная часть установки – высокочастотный лабораторный камертон. В зондовом режиме в одну из ножек камертона ввинчен изогнутый алюминиевый стержень, на конце которого находится шарообразный зонд из пенопласта (используется материал с низкой теплопроводностью, чтобы исключить изменение температуры жидкости за счет отвода тепла через зонд). Зонд погружается в кювету с исследуемой жидкостью. Регистрация температуры производится при помощи термодатчика, помещённого в кювету. В «капельном» режиме жидкость помещается на ножки камертона в виде капель, площадь которых определяется при помощи окуляр-микрометра. Импульс с выхода звуковой карты компьютера усиливается и подается на соленоид. Колебания камертона возбуждаются втягивающимся в соленоид бойком. Запись звуковых колебаний осуществляется с помощью микрофона, подключённого к компьютеру.

Методика измерений

Рабочая формула для расчёта динамической вязкости жидкости по затуханию колебаний камертона имеет следующий вид:

$$\eta = \frac{K}{\rho} \left(\frac{\Delta\gamma}{S} \right)^2,$$

где K - коэффициент пропорциональности, зависящий от параметров камертона и геометрии зонда (для зондового метода), ρ - плотность жидкости, $\Delta\gamma = \gamma - \gamma_0$ - разность декрементов затухания колебаний камертона при наличии капель или при погружении зонда в жидкость и без неё, S – площадь контакта камертона или поверхности зонда с жидкостью. Коэффициент пропорциональности K может быть определён путём калибровки.

Декремент затухания за счет излучения γ_0 определяется непосредственно перед проведением измерений. Данные о затухающих колебаниях обрабатываются в режиме реального времени специально написанной программой, которая выдаёт на экран график зависимости $(\Delta\gamma)^2$ от времени (временное разрешение составляет ~ 1 с). В капельном режиме S определяется как площадь капель с помощью окуляр-микрометра, в зондовом режиме площадь контакта считается постоянной. Температура жидкости измеряется с помощью термопары (с разрешением в 1 градус). Данные о площади и температуре вводятся в программу, которая затем рассчитывает значение вязкости.

Результаты

В работе представлены зависимости скорости затухания колебаний камертона для капель жидкости различной площади и различной вязкости. Предлагается теоретическая модель поведения капли жидкости на поверхности камертона, хорошо объясняющая экспериментальные зависимости [1]. В ходе работы были собраны две установки, на которых была опробована описанная методика, в частности получены температурные зависимости вязкости жидкостей (а также определена энергия активации глицерина, рис. 1), проведены измерения вязкости крови в режиме реального времени [2], начаты исследования по анизотропии вязкости жидких кристаллов.

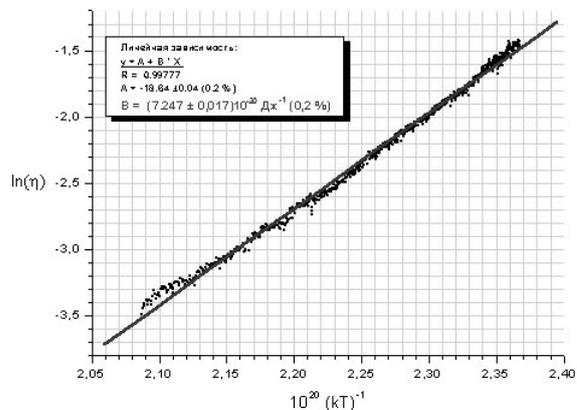


рис. 1

Всё это позволяет говорить о возможности применения данной методики в медицинской диагностике и лабораторном эксперименте (планируется использование данного вискозиметра в физпрактикуме по молекулярной физике физического факультета МГУ).

Список публикаций:

- [1] А. Г. Жданов, А. П. Пятаков, *Измерение динамической вязкости жидкости по затуханию колебаний камертона, Физическое образование в вузах, т.8, п. 4, с. 117-126 (2002)*
- [2] И. Н. Агафонов, А. Г. Жданов, *Исследование динамики свёртывания крови, Международный молодёжный научный конгресс «Молодёжь Наука Общество», Сборник Материалов, Москва 2003, с. 24*

Поверхностное натяжение криогенных растворов азот-кислород и азот-гелий

Андбаева Валентина Николаевна

Малышкин Александр Викторович

Уральский Государственный Университет

Каверин Алексей Михайлович, к.ф.-м.н

kav@itp.uran.ru

Представленная работа посвящена определению поверхностного натяжения криогенных жидких растворов двух типов: 1) раствора с полной взаимной растворимостью компонентов и 2) газонасыщенного раствора. К первому типу относится раствор азот-кислород, ко второму – азот-гелий. В литературе имеются данные о поверхностном натяжении раствора азот-кислород [1-3], однако все они относятся к области низких температур ($T \leq 115 \text{ K}$). В нашей работе мы измеряем поверхностное натяжение этого раствора при более высоких (до 132 K) температурах. Данных о поверхностном натяжении раствора азот-гелий в литературе нет.

Измерения проведены дифференциальным вариантом метода капиллярного поднятия [4]. Исследуемая жидкость находится в стеклянной ампуле, соединённой сверху с системой заполнения и создания давления. В эту же ампулу помещается сборка из трёх капилляров. Капилляры прокальброваны ртутью и их внутренние радиусы составляют $r_1=0,6393 \text{ мм}$, $r_2=0,2297 \text{ мм}$, $r_3=0,0967 \text{ мм}$. Ампула вмонтирована в металлический термостатирующий блок со смотровым окном для визуального наблюдения. На боковой поверхности блока намотаны нагреватели. Вся эта конструкция помещается в стеклянную «рубашку» и опускается в криостат. Охлаждение производится жидким азотом. Температура в блоке поддерживается автоматически и измеряется платиновым термометром сопротивления с погрешностью $0,03 \text{ K}$. Давление в системе измеряется пружинным манометром класса точности 0,15. Для измерения высоты поднятия жидкости в капилляре используется катетометр В 630. Погрешность определения разности высот составляет $0,03 \text{ мм}$.

Опыт начинается с установления заданной температуры в ампуле. Далее в ампулу конденсируется исследуемое вещество. После установления равновесия производится измерение высот поднятия менисков. Для проверки воспроизводимости, исключения случайных ошибок и подтверждения установления равновесия в системе измерения проводились не менее 8 – 12 раз. Периодически производилось перемешивание жидкости. Для этого организовывалось её кипение резким уменьшением давления с последующим его восстановлением. Для контроля достижения равновесия измерения проводились не только при увеличении, но и при уменьшении давления. Капиллярная постоянная раствора рассчитывается как $a_{ij}^2 = h_{ij} / (b_i^{-1} - b_j^{-1})$, где h_{ij} - разность высот поднятия менисков в капиллярах i и j , b_i, b_j - радиусы кривизны менисков в i и j капиллярах, определяемые по уравнению Лейна [4]. Поверхностное натяжение рассчитывается по формуле $\sigma = \frac{1}{2} g a^2 (\rho_{жс} - \rho_r)$, где $g=9,8162 \text{ м/с}^2$ - ускорение свободного падения в месте проведения эксперимента, $\rho_{жс}, \rho_r$ - ортобарические плотности жидкой и газовой фаз. Концентрация раствора определяется из данных о

фазовом равновесии по температуре и давлению насыщенных паров исследуемой жидкости.

Итоговая погрешность эксперимента для капиллярной постоянной составляет 1 – 2 %. В погрешность определения поверхностного натяжения входит ещё погрешность плотности, равная примерно 0,5%.

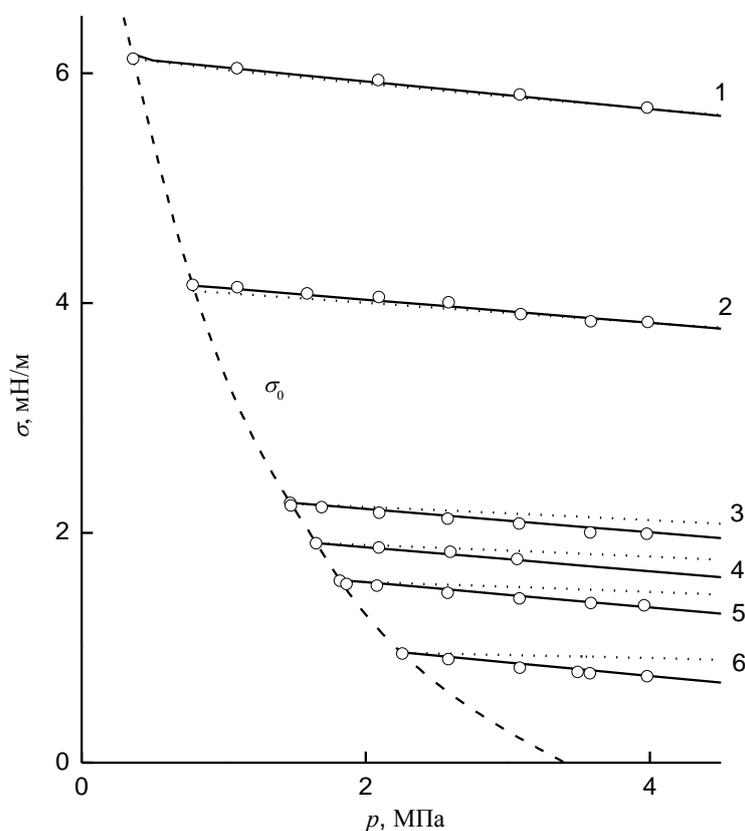


рис. 1. Поверхностное натяжение раствора азот – гелий. Изотермы: 1 – $T = 90\text{ K}$, 2 – 100, 3 – 110, 4 – 112, 5 – 114, 6 – 118. σ_0 – поверхностное натяжение чистого азота.

функцией. Результаты опытов с раствором азот-гелий представлены на рис. 1. Очевиден линейный характер зависимости σ от p . На том же рисунке пунктиром показаны значения σ , рассчитанные по теории [5]. Рассогласование между теоретическими и экспериментальными значениями в области низких температур не превышает 1 % и возрастает по мере повышения температуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект N 02-02-16106), гранта Президента РФ N НШ-905.2003.2 и Программы Отделения ЭММПУ РАН.

Список публикаций:

- [1] Благый Ю.П., Руленко Н.С. // Изв. ВУЗов, Физика, № 2, 22-28 (1959).
- [2] Kai T., Takahashi T. // J. Chem. Engin. Jpn., 27, 827-829 (1994).
- [3] Остроумов В.Б., Остронов М.Г. // ЖФХ, 68, 39-43 (1994).
- [4] Байдаков В.Г. Межфазная граница простых классических и квантовых жидкостей. Екатеринбург, УИФ «Наука» (1994).
- [5] Schmelzer J.W.P., Baidakov V.G., Boltachev G.Sh. // J. Chem. Phys., 119, 6166-6183 (2003).

Для проведения опытов использовались газы высокой чистоты. Паспортная чистота азота составляла 99,999 %, кислорода - 99,999 %, гелия - 99,99 %. Измерения проводились по изотермам в интервале температур 120-132 K (раствор N_2-O_2), 90-118 K (раствор N_2-He). В опытах с газонасыщенным раствором давление гелия повышалось до 4 МПа. На каждой изотерме получено от 4 до 9 значений поверхностного натяжения. В результате опытов с раствором азот-кислород показано, что зависимость поверхностного натяжения от concentra-

ции раствора в пределах погрешности эксперимента может быть аппроксимирована линейной

Неизотропный шум при броуновском движении

Белик Виталий Валентинович

Чичигина Ольга Александровна

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

Романовский Юрий Михайлович д.ф.-м.н

vitae2001@pochtamt.ru

Общепринято под шумом понимать случайные воздействия с нулевым математическим ожиданием и временем корреляции, малым по сравнению с характерными временами исследуемого процесса. При этом также предполагается изотропия случайных импульсов, то есть равные вероятности и амплитуды импульсов в положительном и отрицательном направлениях. Однако существует класс задач, в которых случайные воздействия имеют более сложную структуру. Подобный процесс мы в дальнейшем будем называть процессом с неизотропным шумом.

В работе анализируется абстрактная модель броуновского движения – случайное блуждание крупной частицы в разреженной среде. При рассмотрении условных вероятностей распределения частиц среды, сталкивающихся с броуновской частицей, по скоростям,

$$w(v | удар) = \frac{w(v \cup удар)}{w(удар)} = \frac{w(удар | v)w(v)}{w(удар)} = \frac{|V - v| w(v)}{\int_{-\infty}^{+\infty} |V - v| w(v) dv}, \text{ где } w(v) = \exp(-v^2),$$

было показано, что оно отличается от гауссовского (см. рис.1), при этом наблюдается неизотропность случайных воздействий на макромолекулу (броуновскую частицу) со стороны частиц среды. В качестве меры неизотропности может служить разность вероятностей отрицательных и положительных импульсов случайной компоненты шумового воздействия со стороны частиц среды $\Delta p = p^- - p^+$, которая зависит от скорости движения броуновской частицы (см. рис.2). Отклонение условного распределения от гауссовой формы проявляется в зависимости средней скорости частиц среды, сталкивающихся с макромолекулой, от скорости последней (см. рис.2). Из графиков видно, что можно оценить диапазон скоростей броуновской частицы, в котором наблюдается наибольшая неизотропность. Таким образом, при скоростях броуновской частицы, близкой к скоростям частиц среды характер шумового воздействия среды зависит от скорости броуновской частицы и гипотеза молекулярного хаоса не выполняется. При этом мы не можем использовать ланжевеновский источник белого шума, не зависящий от скорости броуновской частицы.

Также было проведено численное исследование неизотропных процессов в редуцированной модели случайного блуждания на прямой с более сильно выраженной неизотропностью. Показано, что неизотропность приводит к существованию некоторого характерного времени. Это указывает на роль неизотропности при сильно неравновесных процессах, времена релаксации которых больше указанного характерного времени.

Следует отметить, что предложенное рассмотрение задачи может быть обобщено и на случаи другой размерности - двухмерный и трехмерный - при этом не предвидится принципиальных сложностей.

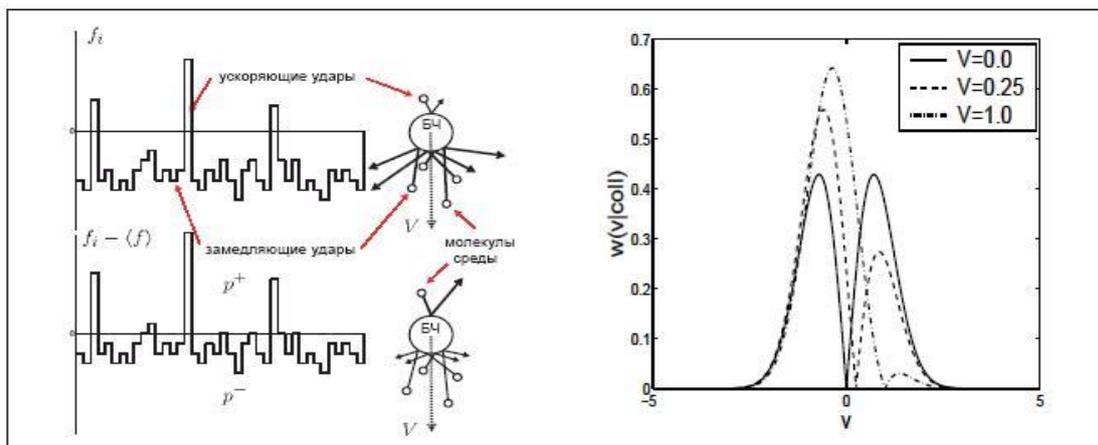


рис.1 **Слева:** Структура случайных импульсов, воздействию которых подвергается броуновская частица при движении в разреженной среде. Временная картина импульсов представлена в левой верхней части рис. Можно исследовать вероятности положительных и отрицательных импульсов p^+ и p^- , рассматривая только случайную компоненту см. рис. внизу слева. При учёте условного распределения частиц среды, сталкивающихся с броуновской частицей, по скоростям, вероятности импульсов p^+ и p^- оказываются существенно разными в определённом диапазоне скоростей броуновской частицы. **Справа:** Распределение вероятностей $w(v|удар)$ скоростей молекул среды, сталкивающихся с броуновской частицей, при разных значениях скорости последней V . Скорость измеряется в единицах $\sqrt{2kT/m}$. Результат численного интегрирования в Matlab.

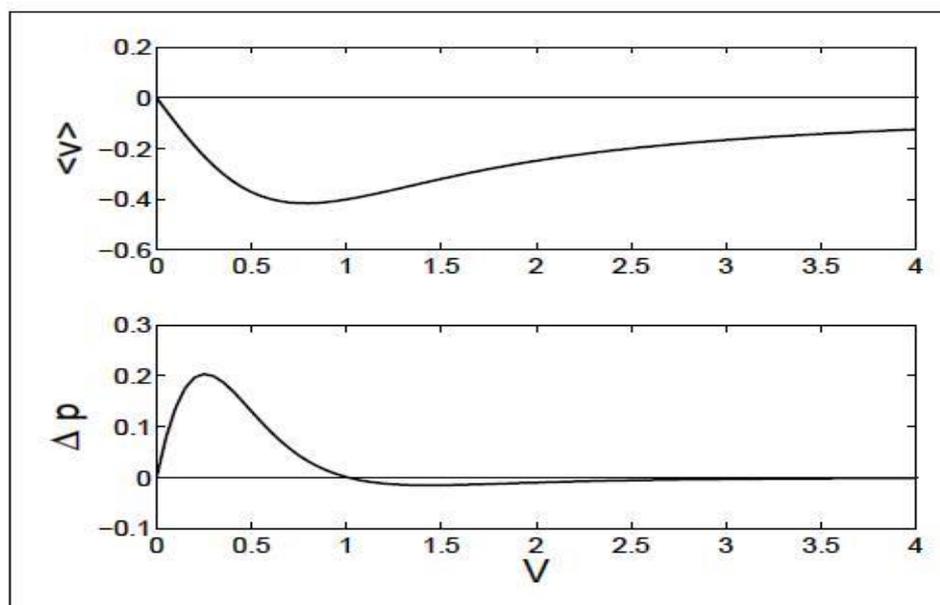


рис.2 **Вверху:** Зависимость средней скорости молекул среды, сталкивающихся с броуновской частицей, от скорости броуновской частицы $\langle v \rangle$. **Внизу:** Зависимость разности вероятностей тормозящих и ускоряющих импульсов за вычетом средней силы $\Delta p = p^- - p^+$. Скорость измеряется в единицах $\sqrt{2kT/m}$. Результат численного интегрирования в Matlab.

Использование метода функциональной автомодельности для описания критических свойств веществ

Богатищева Наталья Сергеевна
Институт теплофизики УрО РАН
Никитин Евгений Дмитриевич, д.ф-м.н
n_bogatishcheva@itp.uran.ru

Параметры критической точки являются важными характеристиками вещества: они требуются для построения уравнений состояния, используются для расчета теплофизических свойств вещества в широком интервале температур и давлений с помощью теории термодинамического подобия. Экспериментальное получение критических параметров многих органических соединений затруднено по причине их термического разложения при температурах ниже критических. Дело в том, что при увеличении молекулярной массы вещества критическая температура увеличивается, в то время как прочность химических связей в молекуле остается неизменной или снижается. Поэтому первые члены ряда являются стабильными, а все более тяжелые гомологи нестабильны в своей критической точке. Целью нашей работы являлось получение уравнений, которые позволяли бы определить критические параметры всего гомологического ряда, зная значение критических параметров лишь одного гомолога.

Мы рассматривали соединения, молекулы которых имеют цепное строение. Как известно, молекула такого вещества состоит из повторяющихся основных групп и концевых групп. Физические свойства (в том числе и критические параметры) рассматриваемых веществ будут зависеть от строения основного звена, числа основных звеньев в молекуле n и строения концевых групп. Представим эту зависимость в виде

$$Y_c(n) = f(Y_c(k), A_1, \dots, A_l, n - k), \quad (1)$$

где $Y_c(k)$ - критический параметр соединения, молекула которого содержит k звеньев, A_1, \dots, A_l - параметры, учитывающие строение основного звена.

Постулируем интуитивно приемлемую функциональную автомодельность [1]:

$$f(f(Y_c(k), A_1, \dots, A_l, m - k), n - m) = f(Y_c(k), A_1, \dots, A_l, n - k) = Y_c(n) \quad (2)$$

$$f(Y_c(k), A_1, \dots, A_l, 0) = Y_c(k) \quad (3)$$

Для восстановления функции, удовлетворяющей групповым свойствам (1), (2) воспользуемся теоремой Ли [2]. Задав функцию Гелл-Манна-Лоу $\xi(Y_c(k)) = \left. \frac{\partial f(Y_c(k), A_1, \dots, A_l, n - k)}{\partial (n - k)} \right|_{n=k=0}$ и решив уравнение, получим искомую функцию.

Для расчета критических параметров веществ с большой молекулярной массой необходимо, чтобы уравнения давали правильную асимптотику при $n \rightarrow \infty$. Проведенные нами ранее исследования поведения критических свойств веществ на основе уравнений состояния полимерных флюидов привели к следующим результатам [3]: при $n \rightarrow \infty$ критическая температура стремится к конечному ненулевому значению, которое зависит от строения основного звена молекулы, критическое

давление стремится к нулю. Для длинных цепей были установлены скейлинговые зависимости: $T_c \sim 1 - n^{-0.5}$, $p_c \sim n^{-1.5}$ (4)

Учитывая это, ведем следующие граничные условия:

$$\text{для давления} \quad p_c(n) \Big|_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \quad \frac{dp_c(n)}{dn} \Big|_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (5)$$

$$\text{для температуры} \quad T_c(n) \Big|_{n \rightarrow \infty} \rightarrow T_c^\infty, \quad \frac{dT_c(n)}{dn} \Big|_{n \rightarrow \infty} \rightarrow 0 \quad (6)$$

Для расчета критической температуры и критического давления было найдено несколько уравнений, удовлетворяющих групповым свойствам (2), (3) и условиям (5), (6). Параметры A_1, \dots, A_l , входящие в уравнения, вычислялись путем обработки экспериментальных данных.

В настоящей работе были совместно проанализированы критические свойства гомологических рядов, молекулы которых имеют строение вида $H(CH_2)_n R$, где R - концевые группы. Так как молекулы рассматриваемых веществ имеют одинаковое строение основных групп, параметры A_1, \dots, A_l для всех рядов имеют равные значения. Параметры определялись методом наименьших квадратов, при этом минимизировалась величина $S = \sum_{i=1}^r \sum_{j=n_{\min}}^{n_{\max}} \frac{1}{\delta_{ij}^2} [Y_{ij}^{exp} - Y_{ij}^{calc}]^2$, где Y_{ij}^{exp} , Y_{ij}^{calc} - экспериментальные и расчетные значения критических параметров соответственно, δ - погрешности измерений, $n_{\min} - n_{\max}$ - диапазон исследования данного гомологического ряда; суммирование по i проводилось для наиболее хорошо изученных рядов. Для описания критических параметров были выбраны уравнения, для которых величина дисперсии была минимальной:

$$T_c(n) = \left[\left[A_1 A_3 (1 - \beta)(n - k) + (T(k)^{A_3} + A_2)^{1-\beta} \right]^{1/(1-\beta)} - A_2 \right]^{1/A_3} \quad (7)$$

$$p_c(n) = \left[p_c(k)^{1-\nu} + A^{1-\nu} (\nu - 1)(n - k) \right]^{1/(1-\nu)} \quad (8)$$

Уравнения применимы для $n \gg 1$ в случае выполнения условий (4), поэтому мы предположили $\beta = 3$, $\nu = 1.4$. Согласно уравнению (7) предельная критическая температура равна $T_c^\infty = (-A_2)^{1/A_3}$. В результате обработки экспериментальных данных было установлено, что для рядов с основным звеном CH_2 $T_c^\infty = 1345.7 K$.

Учитывая, что предложенные уравнения дают правильную асимптотику при $n \rightarrow \infty$ и хорошо описывают экспериментальные данные, мы рекомендуем их для расчета критических параметров гомологических рядов с формулой $H(CH_2)_n R$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №04-02-16111 и НШ-905.2003.2).

Список публикаций:

[1] Павлов П.А., Никитин Е.Д., Доклады Академии Наук, т.337, №2, 187-188 (1994). [2] Ибрагимов Н.Х. Группы преобразований в математической физике, М.:Наука (1983). [3] Никитин Е.Д., Павлов П.А., Теплофизика Высоких Температур, т.38, №5, 716-723 (2000).

Энтропическое моделирование полимерных цепей с использованием алгоритма Ванга-Ландау

Волков Николай Александрович

Воронцов-Вельяминов Павел Николаевич

Санкт-Петербургский Государственный Университет

Воронцов-Вельяминов Павел Николаевич, д.ф.-м.н

wolfmail@yandex.ru

Подход, предложенный Вангом и Ландау в 2001 году, применен для моделирования полимерной цепи на трехмерной решетке. Распределения, полученные посредством равномерного случайного блуждания, сравниваются с результатами энтропического моделирования в рамках алгоритма Ванга-Ландау (ВЛ). В то время как равномерное блуждание дает достоверные результаты в пределах 4-5 порядков, энтропическое моделирование с использованием ВЛ-алгоритма хорошо работает в диапазоне 20-30 порядков при сравнимом с равномерным блужданием времени вычислений. Комбинирование предварительного равномерного блуждания Монте-Карло с энтропическим моделированием в рамках ВЛ-алгоритма позволяет получить значения вероятностей событий до 10^{-30} и более малых с достаточно высокой степенью точности.

В работе рассматривался, как атермический случай (цепи без самопересечений), так и термический, когда учитывался не только эффект исключенного объема, но и наличие энергии взаимодействия при контакте двух не соседних по цепи мономеров. Для коротких цепей результаты моделирования проверялись путем сравнения с точными данными, полученными путем полного перебора всех возможных конфигураций цепи. Результаты, полученные при использовании ВЛ-алгоритма для цепей длиной до 300 мономеров, хорошо согласуются с существующими соотношениями скейлинга. В термическом случае получено распределение цепей по количеству контактов для цепей длиной до 100 мономеров. В результате, в широком диапазоне температур были вычислены канонические средние для внутренней энергии, удельной теплоемкости, энтропии, среднего квадрата расстояния между концами цепи.

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. ВЛ-алгоритм показал себя как эффективный инструмент для изучения равновесных свойств простых полимерных моделей.
2. При использовании ВЛ-алгоритма возможно получение термодинамических величин в широком диапазоне температур в рамках одного блуждания, в отличие от традиционного метода Монте-Карло.
3. ВЛ-алгоритм позволяет моделировать системы с крайне неравномерной плотностью состояний.
4. ВЛ-алгоритм представляется перспективным для изучения более сложных полимерных моделей: континуальных моделей полимеров с фиксированными углами между связями при учете различных потенциалов взаимодействия между мономерами, кольцевых цепей, гетеро-полимеров.
5. Процедура самонастройки параметров ВЛ-алгоритма может оказаться полезной для улучшения метода Монте-Карло в расширенном ансамбле, обеспечив

сокращение, или даже полное исключение, стадии предварительной настройки параметров (балансирующих факторов).

6. Сам ВЛ-алгоритм представляет интерес как объект для изучения и оптимизации с целью увеличения его эффективности.

Подробнее данная работа описана в статье [1].

Список публикаций:

[1] P.N.Vorontsov-Velyaminov, N.A.Volkov, A.A.Yurcenko, *J.Phys.A: Math.Gen.* 37, 1573-1588 (2004).

Усовершенствование методики измерения вязкости методом Стокса

Гугин Павел Павлович

Коптев Евгений Сергеевич.

Новосибирский Государственный Университет

Золкин Александр Степанович, к. ф.-м. н

Савкин Валерий Яковлевич, к. т. н

Anatunau@mail.ru

Способ определения вязкости методом Стокса является классическим и используется во многих университетах при изучении молекулярной физики [1]. Результаты показывают, что на стандартных установках, с измерением интервала времени секундомером, данные по вязкости получаются с погрешностью 15-20%. Основная погрешность связана с определением студентами временных интервалов. Одним из способов повышения точности является использование оптико-электронных методов. В данной работе применяется оптический метод с электронной регистрацией времени движения сферических частиц в глицерине. Это позволило определить установившуюся скорость движения с точностью на порядок выше, по сравнению со стандартной методикой. В результате погрешность измерения вязкости удалось уменьшить в 4-5 раз. Данные по вязкости хорошо соответствуют табличным данным [4].

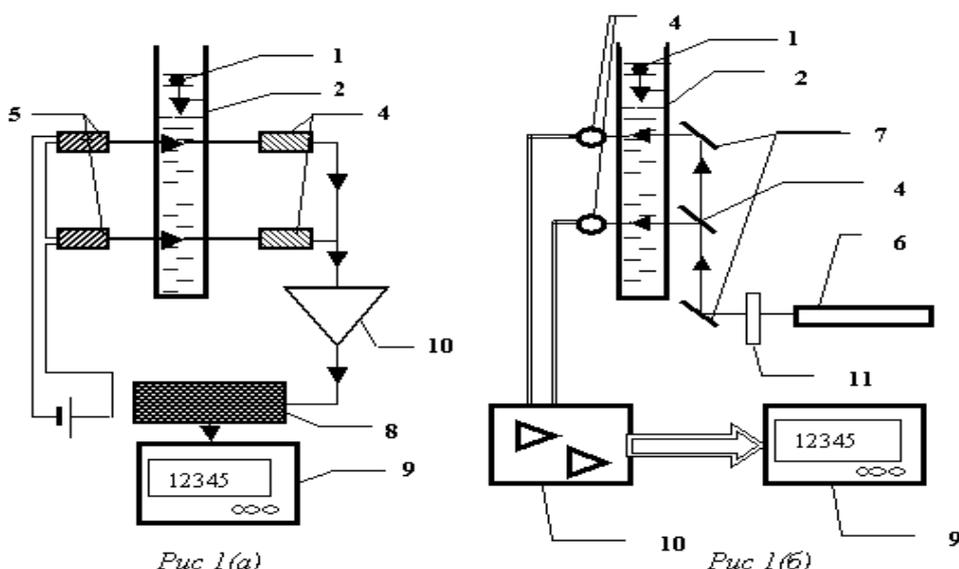


Рис 1(а)

Рис 1(б)

Рис. 1 Схемы установок.

Для проведения экспериментов созданы две установки. В одной из них (*рис. 1б*) применен гелий-неоновый лазер(6) (ЛГ-52-2, $L=0.63\text{мкм}$, мощность 5 мВт) в качестве источника света, а в другой(*рис. 1а*) – светодиоды(5) (АЛ-123, ик-диапазона). Схема экспериментальных установок представлена на *рис. 1*. Длина трубы (2) удовлетворяет требованиям установившейся скорости падения шарика (1). Диаметр трубы много больше диаметра шарика, чтобы избежать влияния стенок. Геометрические размеры луча малы по сравнению с шариком, а также по сравнению с расстоянием между датчиками. При этом процессы передачи и преобразования сигнала проходят за малое время по сравнению со временем необходимым для пересечения шариком одного луча. Использовали специально отобранные шарики диаметром $2,510\pm 0,005\text{мм}$, трубу - диаметром 45 мм и высотой 1м. Цель работы – уменьшение ошибок при измерении временных интервалов и повышения наглядности эксперимента. Применение лазера обусловлено тем, что он дает удобный в работе мощный когерентный пучок света. Луч лазера проходит через цилиндрическую линзу (11), расширяется в горизонтальной плоскости и превращается в оптический нож. Нож попадает на систему зеркал (3),(7), где раздваивается и отклоняется в направлении трубы. Затем фокусируется стеклянной оболочкой трубы и попадает на фотодиоды (4). При работе на установке (*рис. 1б*) пересечение лазерного луча шариком очень хорошо видно. Для второй установки (*рис. 1а*) выбраны светодиоды АЛ-123 излучающие мощность ~ 50 мВт [3]. Излучение светодиода идёт в угол около 60 градусов. Фотодиод (4) ФД-256 (коэффициент передачи 0,5А/Вт [3]) имеет светочувствительный элемент с геометрическими размерами $\sim 1\text{мм}$. Луч на входе в трубу диаметром около 1 мм. От влияния паразитных источников освещения светодиод защищён коллиматором длиной 40 мм и диаметром 1 мм. Для обработки сигнала с фотодиодов, представляющий собой импульс тока были созданы преобразователи тока в напряжение на основе операционных усилителей (10) [5]. Это позволило согласовать датчики, электронную схему (8) и устройство вывода (9). Кроме того, на схеме со светодиодами установлен переключатель, который срабатывает только при определенном уровне сигнала [2]. Это позволяет ещё более точно зафиксировать событие: момент пересечения шариком луча. Время срабатывания переключателя примерно 10^{-6} секунды.

В стандартной установке на лабораторном практикуме положение движущегося шарика в жидкости фиксируется глазом. Ошибка измерения времени составляет примерно 0.2-0.3 сек. В этом случае ошибка определения вязкости – примерно 10-15%. Табличные данные для вязкости глицерина $\eta=1,48\pm 0,072\text{Па}\cdot\text{с}$ при 20°C [4]. Оптический метод позволил измерить время с погрешностью – 0.01-0.03сек. при регистрации частотомером. В этом случае ошибка измерения вязкости- 4-5%. Использование осциллографа даёт менее точный результат. При использовании электронной схемы погрешность измерения времени в 1.5 – 2 раза меньше в сравнении с лазерной установкой, и на порядок меньше в сравнении с осциллографом. Схема слабо реагирует на шумы, что важно при работе на практикумах, где вероятно появление случайных сигналов.

Выводы. Использование оптико-электронного метода дало следующие результаты: 1-вязкость глицерина при 21°C составила $\eta=1,33 \pm 0,066 \text{ Па}\cdot\text{с}$ (*рис. 1б*), $\eta=1,31\pm 0,045 \text{ Па}\cdot\text{с}$ (*рис. 1а*), 2-точность измерения повышена в 4-5 раз по сравнению со стандартной установкой, 3-использование электронной схемы повышает точность в 1,5-

2 раза, 4-разработанная методика может быть рекомендована для практикумов

Список публикаций:

[1]Руководство для лабораторных занятий по физике под ред. Гольдина Л.Л. М 1964г.

[2]Шило В.Л. Полупроводниковые цифровые микросхемы. Челябинск: «Металлургия», 1989г.

[3]Иванов В.И., Аксёнов А.И., Юшин А.М. Полупроводниковые оптоэлектронные приборы. М.: Энергоатомиздат, 1988г.

[4]Кикоин. Таблицы физических величин. Энергоатомиздат, 1976г

[5]П. Хоровиц, У. Хилл, “Искусство схемотехники”, М.:Мир 1986г., т. 1.

Математическое моделирование индукционного нагрева многослойных сред

Давлетбаев Альфред Ядгарович

Бакирский Государственный Университет

Ковалева Лиана Ароновна, д.т.н

DavletbaevAY@rambler.ru

В данной работе рассматривается процесс распространения тепла в системе «эксплуатационная скважина – пласт». Нагрев среды производится индуктором, расположенным на забое скважины, в центре перфорированной части продуктивного пласта. Сконструирован он так, что электромагнитная энергия, выделяемая им, поглощается стенками обсадной колонны. Нефть, нагретая на забое скважины нижним индуктором, движется внутри насосно-компрессорных труб (НКТ) вверх к устью скважины.

За счет индукционного воздействия подогревается нефть и внутри скважины, и находящаяся в продуктивном пласте. Вследствие этого вязкость нефти в пласте уменьшается, и приток ее к забою скважины увеличивается, т.е. дебит скважины возрастает. Индуктор значительно короче толщины пласта h и поэтому пласт будет подогреваться неравномерно по высоте. Из-за этого текущий расход добываемой нефти $Q(z)$ на каждом участке пласта по высоте Dz разный. Общий текущий дебит добываемой нефти из пласта Q_n является суммой текущих расходов добываемой нефти из всех участков пласта.

Задача решается в цилиндрической системе координат r, φ, z с осью z , направленной вдоль оси скважины. Начало координат расположено на подошве пласта. Задача аксиально-симметричная, т.е. температурное поле не зависит от координаты φ . Система «эксплуатационная скважина – пласт – окружающие породы» включает в себя множество различных материалов: металлические стенки труб (сталь), нефть внутри НКТ, нефть или воздух в межтрубном пространстве, пористая среда, насыщенная нефтью, породы, лежащие выше нефтяного пласта. Вследствие этого система «эксплуатационная скважина – пласт – окружающие породы» представляет собой многослойную среду. Индуктор устроен так, что энергия выделяется в виде тепла на стенках обсадной колонны. Из-за малой толщины стенок труб и большой теплопроводности металла, тепло, создаваемое индуктором, мгновенно распространяется, и получаются как бы «внутренние распределенные источники тепла» в стенках обсадной колонны.

Система уравнений. Система уравнений теплопроводности, описывающая процесс распространения тепла в системе «продуктивный пласт – скважина – окружающие скважину породы» имеет вид:

$$(1) \quad \frac{\partial T_{ij}}{\partial t} = \frac{1}{\alpha_{ij} r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_{ij} r \frac{\partial T_{ij}}{\partial r} \right) + \frac{1}{\alpha_{ij}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{ij} \frac{\partial T_{ij}}{\partial z} \right) - v_{ni} \frac{\partial T_{ij}}{\partial z} + \frac{v_{nj} c_n \rho_n}{\alpha_{ij}} \frac{\partial T_{ij}}{\partial r} + \frac{q_{ij}}{\alpha_{ij}};$$

$$Q_n = \int_0^h Q(z) dz. \quad R_1 < r < R_m$$

$$Q(z) = Q_0(z) \frac{\mu_0 \ln \left(\frac{r_k}{r_0} \right)}{\int_{r_0}^{r_k} \frac{\mu_n(r)}{r} dr};$$

$$\mu_n(T) = \mu_0 \cdot \exp(-\gamma(T - T_0));$$

Здесь $b = cM$ и l – объемная теплоемкость и теплопроводность среды; c и ρ – удельная теплоемкость и плотность нефти; q_{ij} – плотность распределенных источников тепла в стенках труб скважины, создаваемых в скважине; Q_0 – первоначальный, до воздействия индуктора, расход добываемой нефти на участке пласта Δz ; μ_0 , μ_n – вязкость нефти при первоначальной температуре и текущая вязкость нефти; T_0 – первоначальная температура пласта и окружающих скважину пород; γ – температурный коэффициент, v_{nj} – скорость фильтрации нефти в пласте, v_{ni} – скорость движения нефти внутри НКТ; Индексы «к» и «н» относятся к контуру питания скважины и к нефти.

Система уравнений (1) решалась методом конечных разностей переменных направлений по неявной схеме. Расчеты проводились применительно к Кучуковскому нефтяному месторождению и Мордово-Кармальской залежи битумов при следующих параметрах среды: $N_0 = 2,5$ кВт – мощность индуктора; $l = 2$ м – длина индуктора; $T_0 = 25$ °С – начальная температура; $\lambda_n = 0,125$ Вт/(мМК) – теплопроводность нефти; $c_n = 1897$ Дж/(кгМК) – удельная теплоемкость нефти; $\rho_n = 957$ кг/м³ – плотность нефти; $\lambda_m = 45$ Вт/(мМК) – теплопроводность металлических стенок труб (стали); $c_m = 461$ Дж/(кгМК) – удельная теплоемкость стали; $\rho_m = 7900$ кг/м³ – плотность стали; $\lambda_{воз} = 0,0315$ Вт/(мМК) – теплопроводность воздуха; $b_{воз} = 143000$ Дж/(м³МК) – объемная теплоемкость воздуха; $\lambda_{окр} = 1,42$ Вт/(мМК) – теплопроводность окружающих пород; $b_{окр} = 4425000$ Дж/(м³МК) – объемная теплоемкость окружающих пород; $H = 1110$ м – глубина залегания пласта; $R_1 = 0,03125$ м – внутренний радиус НКТ; $R_2 = 0,03675$ м – внешний радиус НКТ; $R_3 = 0,05575$ м – внутренний радиус обсадной колонны; $R_4 = 0,06125$ м – внешний радиус обсадной колонны; $R_m = r_k = 8$ м – радиус теплового воздействия; $h_2 = 100$ м – динамический уровень жидкости в межтрубном пространстве; $h = 10$ м – толщина пласта; $\gamma = 0,0422$ – температурный коэффициент вязкости нефти; $Q_{н0} = 4$ м³/сут – начальный общий дебит добываемой нефти. Здесь индексы «м», «воз» и «окр»

относятся к металлу труб, к воздуху, находящемуся в межтрубном пространстве скважины и к окружающим скважину породам.

Рассматривались времена нагрева 10, 20 и 30 суток. Тепло, полученное на забое скважины от индуктора доходит приблизительно до уровня $z = 600$ м. Температура на забое скважины на уровне $z=6$ м увеличивается почти на 25°C – в два раза. отсюда увеличивается общий текущий дебит скважины. Дебит скважины вследствие воздействия индуктора уже через сутки увеличивается на $1,3\text{ м}^3/\text{сут.}$ и дальше не растёт.

Гидродинамика при всплытии одиночного снаряда в прямоугольных каналах малого сечения

Ершов Иван Николаевич

Шамирзаев Алишер Сезгирович

Кузнецов Владимир Васильевич

Новосибирский государственный университет

Кузнецов Владимир Владимирович, д.ф.-м.н

drug@gorodok.net

В работе представлены данные экспериментального исследования всплытия одиночных воздушных снарядов в покоящейся жидкости в вертикальных и наклонных прямоугольных каналах. Хотя бы одна из сторон канала меньше капиллярной постоянной. Показано, что скорость всплытия снарядов в таких каналах определяется в основном протеканием жидкостей в углах канала, и снаряды всплывают даже при маленьких числах Этвеша.

Несмотря на большое число работ, описывающих теплообмен при кипении и режимы двухфазного течения в трубах большого диаметра, они не могут быть использованы прямо при анализе теплообмена в каналах с малым проходным сечением. В стесненных условиях влияние капиллярных сил очень важно. Оно определяет режим течения и, в конечном счете, теплообмен. Цель этой работы – экспериментальное исследование всплытия одиночных снарядов в узких прямоугольных каналах.

При построении моделей течения для снарядного течения многие авторы используют за основу модель Уоллиса, включающую в себя скорость всплытия снаряда в канале с неподвижной жидкостью. Однако эта модель построена для цилиндрических каналов с числами Этвеша $Ео > 4$, т. е. для больших труб.

Измерения скоростей всплытия проводились для этанола, изопропанола-2, ацетона, водно-спиртовых растворов в каналах сечениями $3 \times 5\text{ мм}^2$, $2 \times 7\text{ мм}^2$, $1 \times 3\text{ мм}^2$, $2 \times 5\text{ мм}^2$, $0,5 \times 7\text{ мм}^2$, $1,23 \times 4,9\text{ мм}^2$ при углах наклона канала 30, 45, 60 и 90 градусов времяпролётным способом с помощью гелий-неонового лазера. Моменты прохождения снарядом лучей отмечались по изменению интенсивностей с фотодиодов.

По итогам работы можно сделать следующие выводы:

1. За счет использования наклонных каналов и различных жидкостей опыты данной работы проведены в широком диапазоне изменения определяющих параметров течения.

2. В прямоугольном канале его максимальный размер определяет характер формирования и всплытие снарядов.

3. Проведенная работа позволяет рассчитывать скорость всплытия снарядов в прямоугольных каналах малого размера заполненных вязкой жидкостью.

4. Определено критическое значение числа Этвеша, определённого по наибольшему размеру поперечного сечения канала, когда всплытие снарядов практически прекращается.

Особенности нагрева контактирующих сферических частиц с внутренними источниками тепла при значительных перепадах температуры в неоднородном простом газе.

Ефремов Эдуард Викторович

Дьяконов Сергей Николаевич

Орловский государственный университет

Дьяконов Сергей Николаевич

ovschdn@rekom.ru

1. Получено решение нелинейного уравнения стационарной теплопроводности в тангенциально-сферической системе координат в случае осевой симметрии

$$\nabla(\kappa \nabla T) = 0.$$

2. С учетом степенной зависимости коэффициента удельной теплопроводности от температуры

$$\kappa = \kappa_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^\alpha$$

при следующих условиях на бесконечности

$$\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) \Big|_{z \rightarrow \infty} = q_T$$

и на границе раздела

$$T \Big|_{S=S_j} = T_w, \quad j=1,2$$

решение записывается как

$$\left(\frac{T}{T_0} \right)^{1+\alpha} = 1 + 2q_T \frac{1+\alpha}{\kappa_0 T_0} \frac{\eta}{\xi^2 + \eta^2} +$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\left(\frac{T_w}{T_0} \right)^{1+\alpha} - 1 \right) \sqrt{\xi^2 + \eta^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \left\{ \xi^2 + (-2\eta_2 - \eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{1}{2}} - \right. \\
& \quad - \left\{ \xi^2 + (\eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{1}{2}} + \left\{ \xi^2 + (-2\eta_1 + \eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{1}{2}} - \\
& \quad \left. - \left\{ \xi^2 + (-\eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \right\} - 2q_T \frac{1+\alpha}{\kappa_0 T_0} \sqrt{\xi^2 + \eta^2} \times \\
& \quad \times \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ (-2\eta_2 - \eta + 2n(\eta_1 + \eta_2)) \left\{ \xi^2 + (-2\eta_2 - \eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{3}{2}} - \right. \\
& \quad - (-2\eta_1 + \eta + 2n(\eta_1 + \eta_2)) \left\{ \xi^2 + (-2\eta_1 + \eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{3}{2}} + \\
& \quad + (-\eta + 2n(\eta_1 + \eta_2)) \left\{ \xi^2 + (-\eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{3}{2}} - \\
& \quad \left. - (\eta + 2n(\eta_1 + \eta_2)) \left\{ \xi^2 + (\eta + 2n(\eta_1 + \eta_2))^2 \right\}^{\frac{3}{2}} \right\}.
\end{aligned}$$

3. Вычислен поток тепла, отводимый от поверхности нагретого до температуры T_w агрегата двух касающихся высокотеплопроводных сферических частиц с радиусами кривизны поверхности $R_1 = \eta_1^{-1}$ и $R_2 = \eta_2^{-1}$ соответственно. В его выражении, в отличие от такового для температуры, суммы удастся выразить через специальные функции. Введя радиусы и воспользовавшись понятием ψ -функции, выражение представим как

$$\begin{aligned}
Q_T = \frac{4\pi R_1 R_2}{R_1 + R_2} \frac{\kappa_0 T_0}{1+\alpha} \left(\left(\frac{T_w}{T_0} \right)^{1+\alpha} - 1 \right) & \left(2\gamma + \psi \left(\frac{R_1}{R_1 + R_2} \right) + \psi \left(\frac{R_2}{R_1 + R_2} \right) \right) + \\
& + 4\pi q_T \frac{R_1^2 R_2^2}{(R_1 + R_2)^2} \left(\left(\psi \left(1, \frac{R_2}{R_1 + R_2} \right) - \psi \left(1, \frac{R_1}{R_1 + R_2} \right) \right) \right).
\end{aligned}$$

Исследование теплообмена в стекающей пленке жидкости

Жуковская Олеся Викторовна

Новосибирский Государственный Университет

Чиннов Евгений Анатольевич, к.ф.-м.н

lesya_z@gorodok.net

Изучение механизма теплоотдачи к стекающей пленке жидкости привлекает внимание большого числа исследователей в виду исключительной важности для технических приложений. Предложены обобщающие зависимости и методики расчетов

теплообмена в пленке жидкости недогретой до температуры насыщения [1] и в условиях насыщения при интенсивном испарении [2]. Однако, как правило, эти зависимости дают удовлетворительный результат при относительно не высоких тепловых потоках и больших числах Рейнольдса. В большинстве работ данные получены либо на протяженных нагревателях [3], либо для очень коротких нагревательных элементов [4].

Цель данной работы исследовать влияние испарения, и трехмерных деформаций на теплоотдачу к недогретой до температуры насыщения пленке жидкости от нагревателя среднего размера.

Выполнено экспериментальное исследование теплообмена при течении диэлектрической жидкости FC-72 по вертикальной поверхности с нагревателем размером 60x120 мм в диапазоне значений чисел Рейнольдса от 4.5 до 50.

Исследования выполнялись на нагревателе, представляющего собой плоский теплообменник. Рабочий участок закрывался пластиной из оргстекла, в нижней части рабочего участка устанавливался конденсатор.

Для анализа экспериментальных данных использовался осредненный $\langle \alpha \rangle = \langle q \rangle / \Delta T$ коэффициент теплоотдачи, который определялся по средней плотности теплового потока и разнице между средней температурой на нагревателе и начальной температурой пленки. Полученные из эксперимента осредненные значения $\langle Nu \rangle = \langle \alpha \rangle \delta_0 / \lambda_0$ сравнивали с теоретической зависимостью Нуссельта:

$$\alpha_F = 0.0236 \frac{\mu C_p}{L} 4 Re_F + 2.07 \lambda \left(\frac{g}{\nu^2} \right)^{1/3} (4 Re_F)^{-1/3} \quad (1)$$

Осредненный коэффициент теплоотдачи рассчитывался по следующей зависимости:

$$\langle \alpha \rangle = \frac{\alpha_F}{1 + \frac{\alpha_F L}{\mu C_p Re_F} \left(1 - \frac{q_s}{q} \right)} \quad (2)$$

где L – длина пластины, q_s – плотность теплового потока, расходуемая на испарение жидкости (определялась из эксперимента).

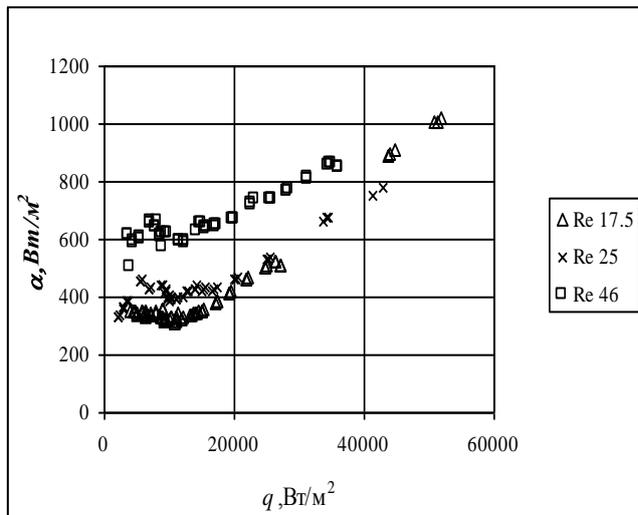


рис.1 Зависимость коэффициента теплоотдачи от теплового потока

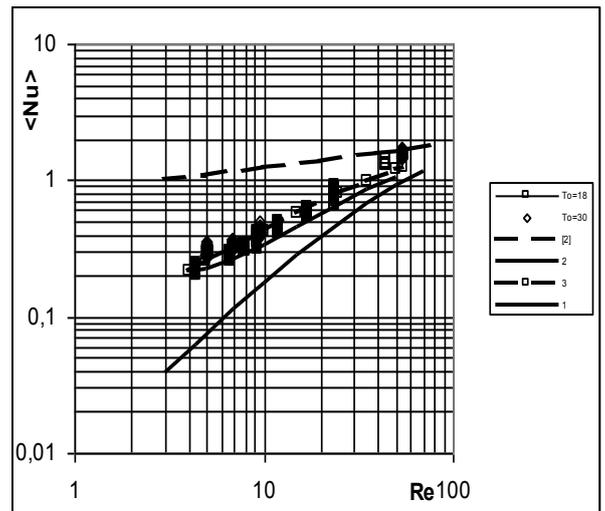


рис.2 Зависимость среднего Nu от Re.
Расчет по (1)-(2): 1- $q_s=0$, 2- q_s для $T_0=18^\circ\text{C}$, 3- q_s для $T_0=30^\circ\text{C}$

- Построена карта режимов течения пленок FC-72 по нагревателю размером 60x120 мм. Выделены области формирования структур и область, где возникает разрыв пленки жидкости и кипение в струях. При $Re > 10$ на поверхности пленки формируются трехмерные волны, которые с ростом теплового потока преобразуются в струи. Разрыв пленки происходит сразу после формирования структур.

- Измерено распределение температур вдоль нагревателя и средняя плотность теплового потока с поверхности пленки жидкости, идущая на испарение.

- Получена зависимость коэффициента теплоотдачи от теплового потока (Рис.1). Возрастание значения коэффициента теплоотдачи наблюдается в области формирования структур. При образовании сухих пятен наблюдается ухудшение теплообмена. В области значений плотностей тепловых потоков более 10 кВт/м^2 наблюдается интенсификация теплообмена к струям жидкости, связанная с интенсивным испарением и кипением.

- Для области пленочного течения получена зависимость среднего числа Нуссельта от числа Рейнольдса (Рис.2). При $Re > 17$ разница между экспериментальными данными и теоретической зависимостью составляет 30-70%, и объясняется влиянием термокапиллярно-волновых эффектов. При малых числах Рейнольдса эта разница возрастает до 300%, но учет испарения с поверхности пленки позволяет обобщить полученные результаты.

Список публикаций:

- [1] Гимбутис Г. Теплообмен при гравитационном течении пленки жидкости. Вильнюс: Моклас. 1988
- [2] Alhusseini et al. Falling film evaporation of single component liquids. 1998
- [3] Fujita T. and Ueda T., 1978 a, Heat Transfer to Falling Liquid Films and Film Breakdown-I (Subcooled Liquid Films), Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 21, pp. 97-108.
- [4] Кабов О.А., Чиннов Е.А., Теплообмен от локального источника тепла к недогретой пленке жидкости, Теплофизика высоких температур, 2001, т. 39, № 5, с. 758-768.

Определение места утечки слабо сжимаемой жидкости из трубопровода по результатам нестационарных исследований

Зиновьев Денис Михайлович

Тюменский Государственный университет

Даниэлян Юрий Саакович, д.ф.-м. н

Dzinovjew@bk.ru

При аварийном повреждении трубопровода возникает переходный процесс движения жидкости, продолжающийся до установления нового стабильного состояния (с учетом дополнительного расхода жидкости на утечку).

Так как причиной возникновения переходного процесса является аварийное повреждение трубопровода, переходный процесс содержит в себе информацию о факте появления повреждения и о его месте.

Рассматриваемый в настоящей работе аналитический метод определения места порыва основан на извлечении соответствующей информации из переходного процесса, вызванного аварийным повреждением.

В качестве физико-математической модели процесса принята система уравнений с частными производными Чарного И.А. для течения слабо сжимаемой жидкости в трубопроводах. Используя преобразование Лапласа, получены аналитические выражения для детерминированного момента расхода на конце трубопровода, найдено точное выражение для определения места порыва, которое предлагается использовать для определения места утечки жидкости. Приведены некоторые численные расчеты.

Предлагаемый метод позволяет определить место порыва трубопровода, используя только нестационарное изменение расхода на конце трубопровода.

Моделирование конвективной сушки каучука

Игошин Дмитрий Евгеньевич

Стерлитамакский Государственный Педагогический Институт

Шагапов Владик Шайхулагзамович д.ф.-м.н

Navydimka@rambler.ru

Построена математическая модель установившегося процесса сушки каучука в сушильной камере в одномерном приближении. Сушильная камера представляет собой вертикальный канал. По нему опускается каучук в виде ленты, насыщенный влагой, переходя с одного горизонтального транспортёра на другой. Вся сушильная камера разделена на зоны горизонтальными перегородками, выполненными из теплоизоляционного материала. В первой зоне и второй по 5 транспортеров, в третьей 7, в четвёртой 2. Снизу печи подаётся сухой воздух, который, поднимаясь по сушилке, отдаёт каучуку тепло на испарение влаги и выходит сверху. По бокам от движущейся ленты расположены циркуляционные вентиляторы. Они засасывают газ из сушильной камеры, подают его на калориферы, где он подогревается и поступает обратно в сушильную камеру. В 4-ой зоне калориферов и вентиляторов нет, т.к. в ней происходит охлаждение каучука и нагревание холодного воздуха, поступающего снизу.

Эта модель, полученная на основе законов сохранения масс и энергии с учётом кинетики испарения воды, представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений. При известных геометрических параметрах сушильной камеры, задавая условия на ее входе и на выходе (температуры и массовые расходы фаз; размеры ленты каучука и его пористость, содержание влаги), то есть граничные условия, решая краевую задачу можно определить термо- и гидродинамическую обстановку в камере. В частности, представленная модель позволяет получить распределения концентрационного состава, температур твердой, жидкой и газообразной фазы, массовых расходов, объемных содержаний по длине, печи в зависимости от интенсивности подачи в печь воздуха и сырья и их начальной температуры.

При получении дифференциальных уравнений в одномерном приближении рассмотрим установившийся режим функционирования камеры. Примем, что каучуковая лента представляют собой полотно шириной b и толщиной h .

Считаем, что воздух подается в количестве достаточном для полного поглощения влаги, выделяющейся при испарении. Предполагается, что испарение происходит полностью внутри каучука. В порах находится парогазовая смесь, т.е. смесь насыщенного водяного пара и воздуха. Пар может выходить в окружающий воздух в двух режимах: 1) Постоянная скорость сушки — когда температура каучука становится постоянной, при этом интенсивность процесса испарения влаги определяется потоком тепла от газовой фазы к каучуку. 2) Меняющаяся скорость сушки — при этом интенсивность процесса испарения влаги определяется разностью концентраций водяного пара внутри каучука и снаружи.

Полагаем, что температура каучука по ширине ленты одинакова. Ось направим вдоль транспортёров по ходу ленты. Давление газа в камере считаем постоянным и равным атмосферному. Каучуковая лента движется с постоянной скоростью v_r . Пренебрегаем усадкой ленты (как по ширине, так и по толщине). Кроме этого, каучук, высыхая, сохраняет свою пористость.

Основные уравнения. Массовые расходы для каучука и воды соответственно:

$$\frac{dm_r}{dl} = 0, \quad \frac{dm_l}{dl} = -J_e \quad m_r = (1 - m)bh\rho_r v_r \quad m_l = mbh\rho_l v_r s_l \quad (1)$$

здесь J_l — интенсивность испарения с единицы длины ленты, m — пористость каучука.

Массовые расходы для водяного пара и сухого воздуха соответственно:

$$\frac{dm_v}{dl} = -J_e, \quad \frac{dm_a}{dl} = 0 \quad m_g = m_a + m_v \quad k_g = k_a + k_v \quad (2)$$

здесь k — массовые концентрации компонент газа. Индексы g , a , v , отнесены соответственно к газу, сухому воздуху и водяному пару.

Уравнение теплового баланса для каучука:

$$\frac{d}{dl} ((m_r c_r + m_l c_l) T_r) = Q_{gr} - J_e L_e \quad \text{где} \quad Q_{gr} = \frac{2b}{h} \beta_r (T_g - T_r) \quad (3)$$

здесь Q_{gr} — тепловой поток от газа к каучуку, β_r — коэффициент температуропроводности для каучука.

Уравнение кинетики испарения влаги с поверхности каучука:

$$J_e = \frac{2b}{h} m D_v \rho'_v (k'_v - k_v) Sh \quad (4)$$

здесь D_v — коэффициент диффузии водяного пара, ρ'_v и k'_v — плотность и концентрация водяного пара внутри каучука, Sh — число Шервуда для ленты.

Задавая в виде граничных условий требование полного испарения воды, а также пренебрегая содержанием водяного пара в поступающем в сушилку воздухе ведём ‘пристрелку’ по конечной влажности и температуре каучука. Мощности калориферов также задаются исходя из требования полного испарения воды.

На основе данной модели были получены следующие результаты:

1) На входе в сушилку (начальный этап) холодный каучук попадает в насыщенную водяным паром горячую газовую атмосферу, происходит конденсация влаги, при этом каучук интенсивно прогревается.

2) Прогрев каучука ведет к уменьшению теплового потока от газа и росту давления насыщенных паров в самом каучуке, что увеличивает интенсивность испарения воды. Процесс выходит на стационар до конца зоны.

3) В начале сушки (1-я секция) температура газа может быть достаточно большой. Это не приводит к перегреву каучука. В последующих секциях температура газа должна быть достаточно низкой для того, чтобы высохший каучук не перегревался. Мощность калориферов 3-й зоны используется в основном уже только для прогрева поступающего снизу холодного газа.

Конвекция идеального диэлектрика в переменном электрическом поле

Ильин Владимир Алексеевич

Пермский Государственный Университет

Сморозин Борис Леонидович, д. ф.-м. н

ilin1@psu.ru

Изучено влияние переменного электрического поля на тепловую конвекцию идеального жидкого диэлектрика, заполняющего плоский горизонтальный конденсатор. Исследование проведено в рамках электрогидродинамического приближения. Идеальный диэлектрик характеризуется отсутствием свободных объёмных зарядов и нулевой электропроводностью. В таких жидкостях на единицу объёма среды действует диэлектрофоретическая сила, возникающая благодаря неоднородности диэлектрической проницаемости, вызванной её зависимостью от температуры. При определённых условиях диэлектрофоретическая сила приводит к перемешиванию жидкости. Известно, что в постоянном поле электроконвекция идеальных диэлектриков возникает благодаря нарастанию монотонных возмущений. В

переменном поле электроконвекция возникает колебательным образом, причём характер отклика зависит от частоты.

Для анализа надкритических электроконвективных режимов в переменном поле использовалась полученная с помощью метода Галёркина трёхмодовая модель электроконвекции (модифицированный триплет Лоренца). Найденные методом Рунге–Кутты–Мерсона реализации временной эволюции амплитуд скорости и температуры анализировались методом быстрого преобразования Фурье и определялся спектральный состав отклика конвективной системы на переменное электрическое поле. Рассмотрен случай нагрева сверху, когда обычная Рэлеевская конвекция отсутствует. Изучено взаимодействие термогравитационного и диэлектрофоретического механизмов неустойчивости.

В ходе исследования изучены и классифицированы надкритические конвективные режимы. В пространстве параметров (электрическое число Рэлея – обратная частота) определены границы областей равновесия, периодических и хаотических режимов конвекции, выяснены сценарии перехода к хаосу. Вычислен теплоперенос через слой жидкости в зависимости от степени надкритичности. С изменением частоты обнаружено чередование областей различных надкритических движений. Соседние области соответствуют двум подклассам синхронных возмущений с различным временным поведением. В точках пересечения границ неустойчивости происходит конкуренция двух мод с различным пространственным периодом.

Исследования, результаты которых представлены в данной работе, выполнялись при частичной финансовой поддержке грантов PE-009-0 Американского фонда гражданских исследований и развития (АФГИР) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант N 03–01–00327).

О гравитационно-инерционной конвекции

Козлов Александр Алексеевич

Пермский Государственный Университет

Путин Геннадий Федорович, д.ф-м.н

a_kozlov@freemail.ru

Усиленное внимание к изучению конвективных процессов в нестационарных силовых полях, применительно к условиям орбитального полета, обусловлено развитием различных космических технологий [1,2].

Анализ реальных условий невесомости на космических аппаратах показал необходимость учитывать влияние на технологические процессы не только гравитационного механизма конвекции, но и меняющихся со временем инерционных ускорений [2,3].

Конвекция в условиях переменных внешних воздействий в настоящее время является предметом многочисленных исследований. Знание картины течения и динамики его эволюции требуется для решения многих гидродинамических задач, и актуально в связи с широким разнообразием технологических приложений. Выполнение необходимых исследований на космических аппаратах сопряжено со сложностью и дороговизной экспериментов. Поэтому целесообразно проводить

лабораторное моделирование явлений в наземных условиях перед непосредственными опытами на космических аппаратах.

Учитывая приведенные выше доводы, было решено провести эксперименты по наблюдению за устойчивостью и структурами возникающих конвективных течений в плоском горизонтальном слое жидкости, находящемся в поле инерционных ускорений круговой поляризации.

$$Ra = \frac{g\beta}{\nu\chi} \Theta H^3 (1), \quad Ra_v = \frac{(\beta b \omega \Theta H)^2}{2\nu\chi} (2), \quad \alpha = \frac{b\omega (\nu\chi)^{1/2}}{gH^2} (3)$$

Результаты экспериментов, представленные в настоящей работе, важны для понимания взаимодействия вибрационного механизма конвекции с термогравитационным механизмом, а также управляющего влияния вибраций на режимы конвективных течений. К таковым относятся пороговые кривые устойчивости в координатах числа Ra_g (1) и его вибрационного аналога Ra_v (2), а также в терминах безразмерной вибрационной скорости α (3) и теплового числа Рэлея при разной ориентации градиента температуры (см. рис.1). Линия а изображает теоретическую границу устойчивости механического квазиравновесия. На вертикальной оси отсекается отрезок $Ra_v = 2,1 \cdot 10^3$, соответствующий порогу возбуждения виброконвекции в условиях невесомости. В исследованной области параметров границей устойчивости квазиравновесия, полученной в ходе экспериментов, для "высоких" частот служит пороговая кривая "b". Результаты эксперимента говорят о том, что поляризованные по кругу инерционные ускорения оказывают дестабилизирующее воздействие на устойчивость механического квазиравновесия жидкости при $Ra_g > 0$. Кроме того, данные вибрации возбуждают конвективные течения при подогреве сверху, а положение пороговых линий зависит от частоты внешних воздействий. Изучена зависимость безразмерного теплового потока – числа Nu в зависимости от интенсивности вибраций и условий подогрева (см. рис.2).

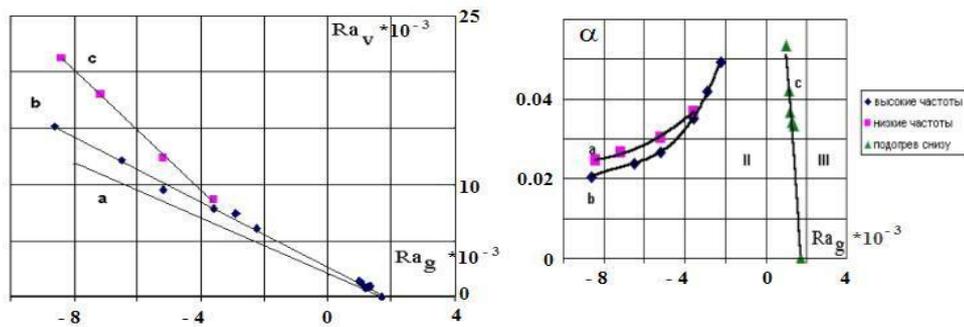


рис.1

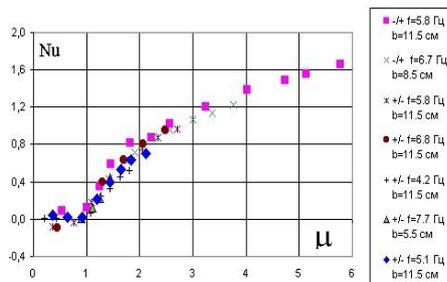


рис. 2

Как видно из графика, в исследуемой области параметров экспериментальные значения, в пределах погрешности, хорошо ложатся на одну кривую. Указанное поведение хорошо согласуется с корневой зависимостью $Nu \sim Ra_g^{1/2}$, имеющей место во многих задачах конвекции. Надо заметить также что, в соответствии с графиком на рис.5, число Нуссельта при надкритичности равной 4 принимает значение 1,4. Для сравнения, при конвекции в статическом поле тяжести число Нуссельта для $Ra_g / Ra_g^* = 4$ принимает значение 1. Это свидетельствует о значительном увеличении теплопереноса, обусловленного вибрационным механизмом конвекции, по сравнению с теплопередачей, вызванной гравитационным механизмом конвекции.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Департамента образования и науки Администрации Пермской области (грант 01–02–96479) и Фонда США гражданских исследований и развития для независимых государств бывшего Советского Союза CRDF (грант PE-009-0).

Список публикаций:

[1] Дубовик К.Г., Никитин С.А., Полежаев В. И. и др. *Конвективные процессы в невесомости и их значение в задачах космической технологии. Гидромеханика и тепломассообмен в невесомости*, Москва, 1982.

[2] Гришин С.Д., Лесков Л.В., *Индустриализация космоса. Проблемы и перспективы*. Москва, Наука, 1987.

[3] Бармин И.В., Безденежных Н.А. и др. *Программа экспериментов на • установке для исследования гидродинамических явлений в условиях невесомости*. Изв. АН СССР, МЖТ, № 4, 1985.

Проявление “эффекта дальнего действия” при фотонном облучении фольг Ni-Cu

Колотов Андрей Александрович

Удмуртский Государственный Университет, Физико-технический институт УрО РАН

Баянкин Владимир Яковлевич, профессор, д.т.н

less@fti.udm.ru

Рядом исследователей было установлено, что при различных энергетических воздействия (например, при ионном облучении) на твердые тела, изменение свойств затрагивает слои, толщина которых существенно превышает ожидаемый (исходя из традиционных представлений, например учета пробега ионов), подобное явление получило название эффекта дальнего действия (ЭД). Изучение данного явления не только представляет научный интерес, но и имеет большое практическое значение, так как лежит в основе метода модификации свойств материалов. Наиболее интересными оказались случаи проявления ЭД при использовании небольших доз облучения. Позднее, подобное явление было отмечено и при облучении материалов потоками фотонов. Однако остается открытым вопрос, о природе протекающих процессов.

В качестве объектов исследования использовались прокатанные фольги Ni-Cu толщиной 30 мкм. Облучение образцов производилось галогенными лампами мощностью (W) 100 Вт и 200 Вт. Микротвердость (H) измерялась на приборе ПМТ-3 (нагрузка на индентор 20 гр.). Распределение компонентов по глубине, до и после

облучения, исследовалось методом ВИМС на масс-спектрометре MS-7201M с использованием распыления поверхности ионами аргона.

Исследование дозовой зависимости изменения микротвердости в широком интервале, показало различный характер поведения H на облученной и необлученной сторонах. H изменяется немонотонным образом, эти изменения носят знакопеременный характер, а при больших дозах стремятся к нулю. После прекращения облучения, наблюдается смещение значений микротвердости к исходному, что может быть обусловлено релаксацией структуры (скорее всего дефектной) со временем к исходному состоянию, поскольку микротвердость является чувствительным структурным параметром. Изменения структуры поверхностных слоев сопровождаются перераспределением элементов в поверхностных слоях фольги (вблизи обеих поверхностей), о чем свидетельствуют результаты ВИМС.

Для выявления роли структурного состояния на проявление “фотонного эффекта дальнего действия” исследовались фольги, отожженные при 600°C в вакуумной печи в течение 30 минут. Как показали измерения микротвердости отожженных образцов, эффект, в данном случае, не наблюдается. Дополнительное исследование методом рентгеноструктурного анализа выявило уменьшение параметра решетки при отжиге (с $3.6346 \pm 0.0001 \text{ \AA}$ до $3.6333 \pm 0.0001 \text{ \AA}$). Теоретическая оценка постоянной решетки данного сплава по закону Вегарда дает 3.5746 \AA .

Основываясь на полученных результатах, а также используя литературные данные, обсуждаются механизмы наблюдаемых явлений.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 02-02-16670)

Температурные аномалии бесконтактно активированных жидкостей

Леонтьева Елена Владимировна

Бердова Елена Сергеевна

Широсов Валентин Георгиевич

Глухова Нина Александровна

*Учебно-научный центр "Резонансные Технологии" Удмуртского
Государственного Университета, научно-исследовательский центр
"ИКАР"*

Широсов Валентин Георгиевич, к.ф.-м.н

svg@uni.udm.ru

Актуальность работы связана с новыми биотехнологиями и, особенно, с задачами получения биологически активных жидкостей (чая, кофе...) с отрицательными значениями окислительно-восстановительного потенциала (ОВП) при различных температурах.

Эффект бесконтактной активации жидкостей (БАЖ) при электролизе без диафрагмы был обнаружен экспериментально (1999) Широсовым В.Г. и Широсовым Е.В. [1]. Экспериментам предшествовали теоретические работы [2, 3], в которых доказана возможность решения проблемы $1/R^3$ – возникновения устойчивых резонансных микрокластеров из двух и более диполей (1984).

При электролизе, под влиянием излучения от контактно активированной жидкости, бесконтактно активируемая жидкость, как и при других способах бесконтактной активации (магнитной, ультразвуковой, лазерной...), переходит в термодинамически неравновесное состояние с резонансной микрокластерной структурой. Известно, что молекула гидроксила OH^- имеет интенсивные линии излучения с длиной волн $\lambda_0 \approx 18$ см, характерные частоты вращательных переходов ~ 2 ГГц. Поэтому следует ожидать, что различные способы нагрева будут по-разному влиять на физико-химические свойства жидкостей. В связи с этим была поставлена цель: определить, при каком способе нагрева изменение ОВП активированной жидкости будет минимальным. Для этого были проведены следующие эксперименты:

Опыт № 1. Предварительно контактно активированная в бездиафрагменном электролизере [5] жидкость (0,9 % раствор NaCl на водопроводной воде) нагревалась до 100°C двумя различными способами: свч полем и термоэлектрическим элементом, после чего охлаждалась до 25°C .

Далее, одновременно проводилась бесконтактная активация трех порций дистиллированной воды в соответствующих трех образцах контактно активированных жидкостей. Результаты опыта представлены на (рис. 1).

Опыт № 2. Иные результаты были получены при исследовании изменения ОВП предварительно бесконтактно активированных жидкостей и их последующего нагрева двумя различными способами. Бесконтактно активированную дистиллированную воду разделяли на 3 равные части, две из которых нагревались до 100°C свч полем либо водяной баней, после чего охлаждались до 0°C в одинаковых условиях. ОВП контрольной пробы релаксировал без нагревания с охлаждением. Результаты представлены на (рис. 2).

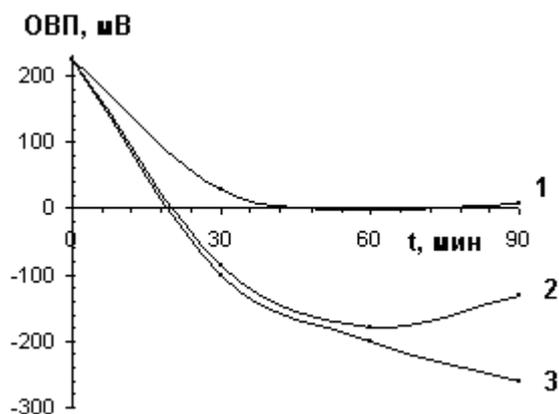


рис. 1. Динамика ОВП БАЖ в активном растворе, после нагревания его термоэлектрическими элементами (1) и свч полем (2), 3 – без нагрева и охлаждения (контрольная БАЖ).

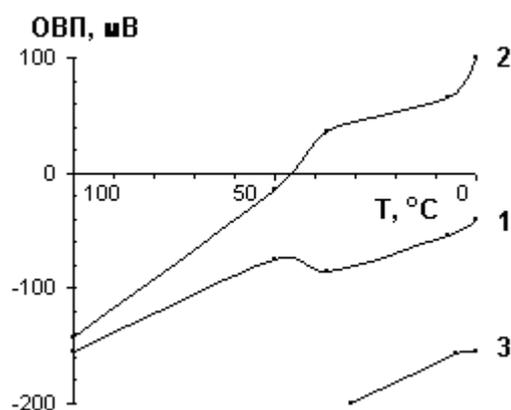


рис. 2. Зависимость ОВП (T) БАЖ, после нагревания в водяной бане (1) и свч полем (2), 3 – контрольная БАЖ.

На основе проведенных исследований можно сделать вывод о нетепловом действии свч поля. Предполагаем, что под воздействием свч в активированных средах происходит разрушение резонансных микрокластеров. Это в свою очередь приводит к возникновению индуцированного излучения от микрокластеров в активированной жидкости, что и объясняет температурные аномалии опытов. Таким образом, можно сделать вывод, что технология приготовления биологически активных жидкостей будет

существенно зависеть как от предыстории их состояния, так и от способа тепловой обработки.

Список публикаций:

- [1] Широносков В.Г., Широносков Е.В., *Опыты по бесконтактной электрохимической активации воды*, сб. докл. 2-й Межд. Симп. Электрохимическая активация в медицине, сельском хозяйстве, промышленности. – М.; ВНИИИМТ АО НПО "Экран", Ч 1, 66-68 (1999) - <http://www.ikar.udm.ru/sb15-12.htm>.
- [2] Широносков В.Г., *Физические основы резонансной активации воды*, Сб. докл. 1-й Международный симпозиум "Электрохимическая активация в медицине, с/х, промышленности", – М.: ВНИИИМТ НПО "ЭКРАН", 220-221 (1997) - <http://www.ikar.udm.ru/sb1-2.htm>.
- [3] Широносков В.Г., *Резонанс в физике, химии и биологии*, Ижевск, Изд. дом "Удмуртский университет", 1-92 (2001) - <http://www.ikar.udm.ru/sb22.htm>.
- [4] Широносков В.Г., *Феномен живой воды и его простое объяснение*, Сб. докл. XIII Международного симпозиума "Международный год воды - 2003", Австрия, 246-248. (2003) - <http://www.ikar.udm.ru/sb28-1-3.htm>.
- [5] Леонтьева Е.В., Глухова Н.А., Широносков В.Г., *Сб. тез. Девятой Всероссийской научной конференции студентов физиков и молодых ученых, 2*, Екатеринбург-Красноярск: изд-во АСФ России, 823-824 (2003).

Особенности течения высококонцентрированных обратных водонефтяных эмульсий в капиллярах, трещинах и пористых структурах

Мавлетов Марат Венерович

Глухов Владимир Викторович

Саметов Сергей Павлович

Башкирский Государственный Университет

Институт механики УНЦ РАН

Ахметов Альфир Тимирзянович, к.ф.-м.н

codehope@yandex.ru

Водонефтяные эмульсии успешно используются как жидкости для глушения скважин, для выравнивания профиля приемистости скважин [1,2]. Для успешного применения эмульсионных технологий требуется детальное изучение движения эмульсий в пористой структуре, исследования механизма процессов преобразования дисперсных и дисперсионных фаз при фильтрационном течении.

С целью выяснения процессов, идущих в пласте при движении эмульсий, ранее [3] были проведены эксперименты на физических моделях элементов пласта – трещине (ячейке Хили-Шоу) и пористой структуры (микромодели). В дальнейшем также были поставлены эксперименты на капиллярах.

В опытах использовалась стабилизированная «Нефтенолом НЗ» высококонцентрированная обратная водонефтяная эмульсия. Ее течение в щелевидной модели и микромодели при постоянном перепаде давления приводит к неожиданному эффекту динамического запираания, при котором процесс фильтрации, несмотря на значительный постоянный градиент давления, со временем практически полностью прекращался.

С целью более детального изучения фильтрации эмульсии были проведены эксперименты по их течению в капиллярах. Во-первых, течение в капилляре является

осесимметричным; во-вторых, можно использовать капилляры различного диаметра, что было затруднительно при фильтрации на моделях трещины и пористой структуры

Опыта проводились на капиллярах диаметром 45, 102, 250 и 700 мкм.

При течении эмульсии через капилляр, диаметром 700 мкм эффекта динамического запираания не наблюдается. За все время эксперимента расход уменьшается в 2 раза. Иная картина получается при течении через капилляр, радиусом в 50 мкм. По истечении минуты течение эмульсии почти полностью прекращается. Хотя если смотреть на процесс фильтрации под микроскопом наблюдается некоторое движение эмульсии, но для весов, при помощи которых регистрировался расход, оно слишком мало, чтобы его можно было зарегистрировать.

При течении эмульсии в капилляре, диаметром 45 мкм, запираание происходит за 2-3 минуты.

Можно сделать вывод о существовании некоторого критического радиуса при котором может наблюдаться эффект запираания. Чем меньше радиус поровых каналов и трещин, тем быстрее они «запираются».

Также была предпринята попытка объяснить данный эффект с позиции особенных реологических характеристик исследуемой среды. Измерения проведенные методом конус-пластина показали наличие у данной эмульсии кривой гистерезиса. Если произвести измерения вязкости, постепенно увеличивая скорость, а затем уменьшая, то измеренные точки будут лежать на двух кривых, одна из которых, получена при измерении вязкости с увеличением скорости сдвига, а другая с уменьшением скорости сдвига. За время проведения эксперимента эмульсия «упрочнилась», т. е. она является средой с нестационарными реологическими характеристиками. Поведение эмульсии зависит от предыстории процесса. С увеличением времени воздействия эмульсия «разупрочняется»

Теоретическое объяснение, наблюдаемого эффекта можно дать в рамках модели движения вязкосыпучих сред. Стабилизированная эмульсия рассматривается как суспензия, т.е. капли воды, окруженные молекулами ПАВ, рассматриваются как твердые частицы. Полученные в рамках модели результаты вполне согласовываются с экспериментальными данными. Но наблюдаемая картина течения настолько сложна, что требуется привлечение более сложных моделей для описания течения стабилизированных эмульсий.

Список публикаций:

[1] Орлов Г. А., Кендис М. Ш., Глуценко В. Н. *Применение обратных водонефтяных эмульсий в нефтедобыче*. М.:Недра, 1991, 224 с.

[2] Мухаметзянов Р. Н., Сафин С. Г., Каюмов Л. Х. *Промысловые испытания эмульсионных композиций для выравнивания профиля приемистости нагнетательных скважин*. – *Геология, геофизика и разработка нефтяных месторождений*, 1999, №4, с. 30-33.

[3] Ахметов А. Т., Телин А. Г., Глухов В. В., Мавлетов М. В. и др. *Особенности течения высококонцентрированных обратных водонефтяных эмульсий в трещинах и пористых средах*. *Технологии ТЭК*. №2. с.54-58

Фильтрация многокомпонентных систем в пористых средах с учетом адсорбции

Мавлетов Марат Венерович

Бакирский Государственный Университет

Ковалева Лиана Ароновна, д.т.н

codehope@yandex.ru

Динамика сорбции из многокомпонентной смеси, движущейся в пористой среде, в рамках одномерной диффузионной модели описывается следующими уравнениями:

$$\frac{\partial mc_i}{\partial t} + v \frac{\partial c_i}{\partial x} + \frac{\partial a_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \right), \quad 0 < x < L, \quad t > 0 \quad (1)$$

Здесь c_i и a_i – концентрация i -го компонента в подвижной фазе и в адсорбированном состоянии, соответственно; v – средняя скорость фильтрации смеси; m – пористость, которая зависит от количества, адсорбированного на поверхности пор вещества; L – характерный размер пористой среды; D_i – эффективный коэффициент диффузии.

Уравнение материального баланса (1) следует дополнить уравнениями кинетики сорбции, которые имеют различный вид в зависимости от принимаемой модели адсорбции:

$$\frac{da_i}{dt} = \beta_i (c_i - y_i) \quad (2)$$

где β_i – эффективный коэффициент массообмена, учитывающий скорость массообмена, y_i – концентрация частиц в жидкости, находящихся в равновесии с адсорбированными частицами.

Также необходимо задать уравнение зависимости пористости от концентрации адсорбированного вещества:

$$a_i(x, 0) = 0, \quad c_i(x, 0) = c_{0i}, \quad 0 < x < L \quad (5)$$

В зависимости от выбранной модели кинетики сорбции, а, следовательно, параметров, характеризующих процесс сорбции, данная система проявляет различные свойства, в том числе хаотические колебания в распределениях концентраций адсорбированных веществ и веществ в потоке, о чем свидетельствует наличие в системе странного аттрактора (рис. 1).

$$c_i(0, t) = c_i^0, \quad \left. \frac{\partial c_i}{\partial x} \right|_{x=L} = 0, \quad t \geq 0, \quad 1 \leq i \leq n$$

Предельные перегревы криогенных растворов азот – кислород и кислород – гелий

Малышкин Александр Викторович

Лебедева Евгения Андреевна

Андбаева Валентина Николаевна

Уральский Государственный Университет

Каверин Алексей Михайлович, к.ф.-м.н

kav@itp.uran.ru

Реальные фазовые переходы всегда происходят с отклонениями системы от состояния равновесия и сопровождаются образованием метастабильных фазовых состояний вещества. Эти состояния не вполне термодинамически устойчивы и характеризуются конечным временем своего существования. С глубиной захода в метастабильную область – степенью отклонения фазового перехода от равновесия – время жизни метастабильного состояния уменьшается. Частным случаем рассматриваемых процессов является перегрев жидкости за линию насыщения. К настоящему времени проведены исследования предельных перегревов чистых жидкостей [1] и начаты опыты с растворами [2]. Разработана теория, связывающая время жизни раствора в метастабильном состоянии с его термодинамическими свойствами [3]. Предполагается, что основной причиной задержки фазового перехода является необходимость преодоления потенциального барьера, обусловленного образованием в жидкости микроскопического пузырька пара (зародыша), способного к дальнейшему росту, а основными факторами, обеспечивающими преодоление этого барьера, являются термические флуктуации в системе.

Итоговое выражение теории имеет вид: $J = cV \exp(-W^*/kT)$, где J – частота появлений зародышей пара (величина, обратная среднему времени жизни перегретой жидкости), c – числовая плотность перегреваемого вещества, V – кинетический коэффициент, W^* – работа образования жизнеспособного зародыша пара: $W^* = 16\pi\sigma^3/3(p^* - p)^2$. Здесь p^* , p – давление в зародыше и в окружающей зародыш жидкости, соответственно, σ – поверхностное натяжение.

В данной работе экспериментально исследована кинетика спонтанного вскипания перегретых криогенных растворов. Объектами изучения являются: 1) раствор с полной взаимной растворимостью компонентов азот-кислород и 2) газонасыщенный раствор кислород-гелий.

В наших опытах использован метод измерения времени жизни перегретой жидкости в "чистой" пузырьковой камере. Исследуемый раствор объемом $\sim 70 \text{ мм}^3$ перегревался в верхней части стеклянной трубки внутренним диаметром $\sim 1 \text{ мм}$. Нижняя часть трубки соединена с металлическим сильфоном. Давление в системе создавалось сжатым гелием и передавалось на жидкий раствор через сильфон. Концентрация раствора задавалась составом конденсируемой газовой смеси и контролировалась в процессе опыта по давлению насыщенных паров. Погрешность определения концентрации ± 0.5 моль. Заход в метастабильную область осуществлялся сбросом давления на термостатируемую жидкость до заданного значения p . Погрешность измерения давления $\pm 0.01 \text{ МПа}$, температуры $\pm 0.03 \text{ К}$. В момент окончания сброса давления запускался хронометр, который фиксировал время нахождения раствора в метастабильном состоянии до его вскипания. После вскипания

раствора в камере сиффона создавалось первоначальное давление, и процесс измерения продолжался. Среднее время жизни τ определялось по результатам $N = 10 - 50$ измерений. Частота зародышеобразования рассчитывалась как $J = 1/(\tau V)$.

Все измерения проведены по изобарам в интервале температур 110-140 K при давлениях $p = 0,5$ и 1,0 МПа (раствор азот-кислород) и 1,171; 1,667 МПа (раствор кислород-гелий). Исследованный интервал частот зародышеобразования составил $10^4 - 10^8 \text{ м}^{-3}\text{с}^{-1}$. В результате опытов с раствором азот – кислород показано, что зависимость температуры предельного перегрева от концентрации раствора может быть аппроксимирована линейной функцией. Результаты опытов для раствора кислород-гелий (изобара $p = 1,667$ МПа) представлены на рис. 1.

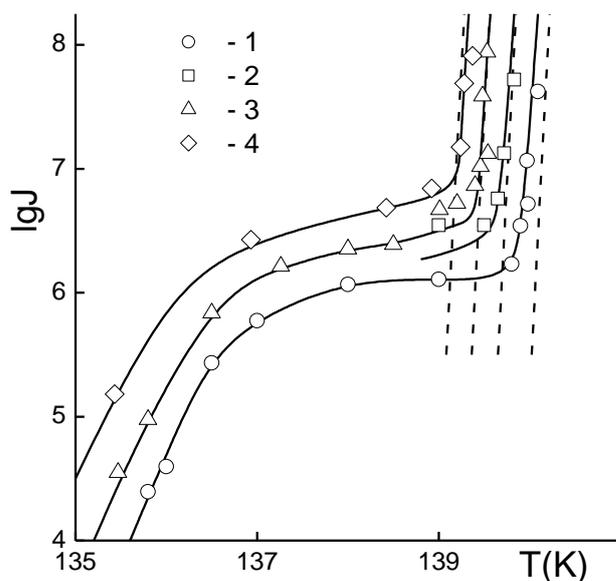


Рис. 1. Температурная зависимость частоты зародышеобразования в растворе кислород – гелий при давлении $p = 1,667$ МПа и концентрациях гелия: 1 – $x = 0$ мол.%; 2 – 0,08; 3 – 0,14; 4 – 0,20. Штриховые линии – расчет по теории гомогенной нуклеации.

Характер зависимости $J(T)$ одинаков для всех исследованных растворов. На всех экспериментальных кривых наблюдаются участки резкого возрастания частоты зародышеобразования, которые соответствуют спонтанному (флуктуационному) вскипанию раствора. С этими участками могут быть сопоставлены результаты расчета по теории гомогенной нуклеации, изображенные на рис. 1 штриховыми линиями. Для обоих растворов наблюдается удовлетворительное согласие теоретических и экспериментальных данных. Поверхностное натяжение растворов,

использованное в расчетах, для раствора кислород – гелий бра-лось из литературы [4], а для раствора азот - кислород было измерено авторами в специальном опыте и представлено в виде отдельного доклада на данной конференции.

При расчётах учитывалась зависимость поверхностного натяжения жидкости от кривизны поверхности раздела фаз.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект N 02-02-16106), гранта Президента РФ N НШ-905.2003.2 и Программы Отделения ЭММПУ РАН.

Список публикаций:

- [1] Байдаков В.Г. Перегрев криогенных жидкостей. Екатеринбург, УрО РАН (1995).
- [2] Baidakov V., Kaverin A., Boltachev G. // *J. Phys. Chem.* **B106**, 167-175 (2002).
- [3] Baidakov V.G. // *J. Chem. Phys.* **110**, 3955-3960 (1999).
- [4] Baidakov V.G., Sulla I.I. // *Int. J. Thermophys.* **16**, 909-927 (1995).

Влияние выбора псевдопотенциальной модели на точность расчёта структурных факторов Бхатиа –Торнтон

Мальханова Ольга Геннадьевна

*Институт металлургии Уральского Отделения Российской Академии
Наук*

Дубинин Николай Эдуардович, Ватолин Николай Анатольевич

m_o_l_a@mail.ru

Метод модельного псевдопотенциала (МП) в сочетании с вариационным методом термодинамической теории возмущений успешно используется для расчёта термодинамических и структурных свойств металлических расплавов. Ранее [1,2] мы применили названный подход для расчёта структурного фактора Бхатиа -Торнтон «концентрация-концентрация» в длинноволновом пределе, $S_{cc}(0)$, двухкомпонентных систем щелочных металлов в жидком состоянии вблизи температуры плавления.

В работе [1] нами использовался локальный МП Анималу-Хейне в сочетании с обменно-корреляционной функцией Вашишты-Сингви.

В работе [2] мы применили модифицированный локальный модельный псевдопотенциал Анималу-Хейне, в котором учитывается зависимость глубины потенциальной ямы от состава исследуемой системы.

Целью настоящей работы является расчёт $S_{cc}(0)$ с использованием более широкого круга псевдопотенциальных моделей для выявления наиболее адекватной из них с точки зрения количественного описания данной характеристики.

По анализу согласия результатов расчёта концентрационных зависимостей $S_{cc}(0)$ для расплавов Na-K, Na-Cs, K-Cs при температуре 373К с экспериментальными данными сравнивается точность следующих вариантов сочетания МП с обменно-корреляционной функцией:

1. Локальный МП Анималу-Хейне с обменно-корреляционной функцией Вашишты-Сингви [1]
2. Модифицированный локальный МП Анималу-Хейне с обменно-корреляционной функцией Вашишты-Сингви [2]
3. Модифицированный локальный МП Анималу-Хейне с дополнительным учётом зависимости глубины потенциальной ямы от атомной плотности с обменно-корреляционной функцией Вашишты-Сингви
4. Локальный МП Анималу-Хейне с обменно-корреляционной функцией Тойго-Вудруффа
5. Локальный МП Анималу-Хейне с обменно-корреляционной функцией Гелдорта-Воско
6. Локальный МП Краско-Гурского с обменно-корреляционной функцией Гелдорта-Воско

Каждая из шести вышеперечисленных комбинаций используется также для аналогичного расчёта применительно к системам Na-Rb, K-Rb, Rb-Cs, для которых экспериментальная информация по $S_{cc}(0)$ отсутствует.

Проведённое исследование показывает, что выбор псевдопотенциальной модели мало влияет на результаты расчёта $S_{cc}(0)$ для всех рассмотренных систем. Тем не менее, несколько лучшее согласие с экспериментальными данными наблюдается в случае использования комбинации МП Краско-Гурского с обменно-корреляционной функцией Гелдорта-Воско.

Таким образом, выявлено, что изменения в рамках псевдопотенциального подхода не могут привести к значительному улучшению количественных результатов при исследовании структурных характеристик. Прогресс в этой области может быть, очевидно, достигнут путём замены твёрдосферной системы сравнения в вариационном методе на более реалистичную.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минпромнауки РФ (грант поддержки ведущих научных школ №2022.2003.03)

Список публикаций:

[1] Мальханова О. Г. , Дубинин Н.Э. Структурные факторы Бхатиа –Торнтон бинарных расплавов щелочных металлов. ВНКСФ-8, 322

[2] Мальханова О. Г. , Дубинин Н.Э., Трефилова Т.В. Проверка применимости модифицированного псевдопотенциала Анималу –Хейне к расчёту структурных характеристик металлических расплавов. ВНКСФ-9, 394-395,

Молекулярно-динамическое исследование структуры и свойств воды на основе SP3-модели

Митрофанов Василий Владимирович

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Романовский Юрий Михайлович, д.ф.-м.н

vasily.mitrofanov@rambler.ru

Еще с середины 20-го столетия, «чистая» вода (H_2O), а также различные водосодержащие молекулярные системы являются объектами пристального внимания ученых и наиболее популярны в численном эксперименте. При молекулярно-динамическом (МД) моделировании модели молекулы воды принято разделять на «жесткие» и «мягкие». «Жесткая» модель подразумевает, что молекула H_2O представляет собой недеформируемое твердое тело с жесткими связями. Это означает, что все молекулы являются идентичными, и их форма не зависит от окружения. «Мягкие» модели, напротив, допускают возможность изменения валентных длин и углов вблизи их положений равновесия. В большинстве работ по МД моделированию, выполненных вплоть до 90-х годов 20-го века, использовались «жесткие» модели молекулы воды. Это связано с тем, что для них расчет динамики системы можно производить, используя не слишком маленький шаг интегрирования – порядка 1 фс. При моделировании систем, состоящих из «мягких» молекул, необходимо описывать индивидуальное движение каждого атома молекулы. Такие алгоритмы требуют меньшего шага интегрирования – порядка 0,1 фс, а значит, возрастает полное время расчета динамики системы.

Основой современной структурной модели воды является непрерывная нерегулярная тетраэдрически-координированная сетка H-связей (ВС). Методами теории перколяции однозначно доказано, что H-связанные молекулы в воде не могут

образовывать отдельных мелких ассоциатов, а должны быть объединены в единую сетку ВС, заполняющую все пространство. Из колебательных спектров следует, что разорванные ВС в этой сетке практически отсутствуют. Таким образом, основное в структуре воды – это единая непрерывная сетка Н-связей.

Вопрос об истинном количестве разорванных Н-связей в воде может быть достаточно определенно решен на основе экспериментальных данных колебательной спектроскопии, которые дают наиболее подробную информацию о ВС. Частота валентных колебаний ОН-группы сильно уменьшается под действием Н-связи, тогда как любые Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия приводят к существенно меньшим смещениям. Поэтому ОН-группам, не вступающим в ВС, должна соответствовать узкая линия примерно на той же частоте, что дают мономеры воды. На самом деле в воде на этой частоте никогда не видно узких линий, и она соответствует склону широкой полосы ОН-осцилляторов, возмущенных Н-связью. Таким образом, в жидкой воде разорванные Н-связи практически отсутствуют.

Для интерпретации результатов МД моделирования необходимо иметь критерий образования Н-связи между молекулами воды. Существует два типа таких критериев – энергетические и геометрические. С точки зрения энергетических критериев, впервые введенных в работах А. Рамана и Ф. Стиллинджера, Н-связь образуют те молекулы, энергия взаимодействия которых по абсолютной величине больше некоторого условно выбранного значения $E_{НВ}$. Как правило, поиск Н-связей осуществляется при использовании нескольких значений $E_{НВ}$. Геометрический критерий накладывает ограничения на расстояния О...О, угол О–Н...О и/или расстояние О...Н. Две молекулы считаются связанными Н-связью, если расстояния не превышают своих предельных значений, а угол, напротив, не меньше своего предельного значения.

В данной работе методами МД исследуются структура и свойства жидкой воды при различных температурах. В качестве модели молекулы воды выбрана SP3-модель – «мягкая» трехточечная модель с силовыми центрами на атомах. Моделируемая система представляет собой «каплю» размером $20.2\text{\AA} \times 20.2\text{\AA} \times 20.2\text{\AA}$, состоящую из 265 молекул H_2O , что соответствует плотности $\rho \approx 1,0 \text{ г}\cdot\text{см}^{-3}$. На основе результатов численного моделирования исследованы динамика и статистические свойства Н-связей в воде. Установлено, что время их жизни изменяется в достаточно широких пределах – от долей пикосекунд до десятков пикосекунд; в воде существуют би-, трифуркатные и т.д. Н-связи. Обнаружено, что разрыв Н-связи не обязательно связан со сменой молекулы-партнера, он может быть вызван ее «переключением», либо переменой ролей молекул H_2O , участвующих в образовании Н-связи. Методом теории перколяции, а так же при помощи анализа спектра валентных колебаний ОН-групп молекул воды в температурном диапазоне $T = 263 \div 373 \text{ К}$ подтвержден факт существования в воде единой непрерывной сетки Н-связей. Произведен расчет значений коэффициента самодиффузии воды в температурном диапазоне $T = 278 \div 318 \text{ К}$. Полученные значения совпадают по порядку величины с экспериментальными данными. С целью обнаружения полос поглощения в воде, а так же изучения степени деформации спектров колебаний валентных ОН-групп и валентных углов Н–О–Н под действием Н-связей были рассчитаны соответствующие спектральные характеристики. И для ОН-групп и для углов Н–О–Н величина частотного сдвига при $T = 298 \text{ К}$ оказалась приблизительно равной $15 \div 20 \text{ пс}^{-1}$.

Работа поддержана грантами НШ-2071.2003.4, INTAS 01-450.

Молекулярно-динамическое моделирование самоорганизации наноструктур при взаимодействии малых капель с поверхностью твердого тела

Никифорова Елена Владимировна

Пушкарь Максим Юрьевич, Дронников Владимир Владимирович, Харечкин Сергей Сергеевич

Тверской государственный университет

Самсонов Владимир Михайлович

p000185@tversu.ru

На основе изотермической молекулярной динамики моделировались процессы структурообразования при взаимодействии наноразмерных частиц с поверхностью твердого тела, в частности, процессы формирования пирамидоподобных структур типа германиевой пирамиды и образования ориентированных кластеров в системах из жестких стержнеобразных молекул.

При разработке и производстве микро- и наноэлектронных систем, а также других наноразмерных устройств приходится решать две взаимнопротиворечивых задачи: 1) миниатюризация рабочих элементов; 2) обеспечение их стабильного существования и функционирования. Решение указанной проблемы невозможно на чисто эмпирическом уровне и требует привлечения, как теоретических подходов, так и математического моделирования. В настоящее время можно выделить три основных подхода к созданию наноструктур на твердых поверхностях: 1) использование прецизионного инструмента типа острия атомного силового микроскопа; 2) направленный химический синтез; 3) самоорганизация наноструктур. Исследования по молекулярно-динамическому моделированию растекания наноразмерных капель, проводимые нами в течение ряда лет показывают, что растекание нанометровых капель является одним из путей самоорганизации (самосборки) двумерных и трехмерных наноструктур на твердых поверхностях.

Результаты, полученные нами на основе молекулярно-динамического моделирования, выявили ряд общих закономерностей между растеканием макроскопических капель и эволюцией наночастиц в поле твердой поверхности. Растекание наночапель простых и полимерных жидкостей моделировалось на основе изотермической молекулярной динамики для следующих трех типов твердых подложек: 1) континуальные поверхности; 2) твердое полупространство с атомной структурой, отвечающей различным типам кристаллических решеток; 3) гетерогенные поверхности, представленные высоко- и низкоэнергетическими участками. Последний случай отвечает наиболее сложному информационному полю. Нами было показано, что подложка, индуцирует кристаллическую или жидкокристаллическую упорядоченность в растекающейся капле, а также в ее конечной конфигурации. Ориентационная упорядоченность и формирование двумерных кластерных структур особенно отчетливо проявляются для стержнеобразных линейных молекул даже в случае континуальной, т.е. бесструктурной подложки.

Одним из наиболее интересных объектов, полученных с помощью самосборки атомов, является германиевая пирамида, полученная в лабораторных условиях самосборкой атомов германия на поверхности кремния. Нами показано, что структуры типа германиевой пирамиды могут быть получены и в процессе взаимодействия леннард-джонсовской наноразмерной капли (кластерного пучка) с твердой

поверхностью в условиях ее постепенного охлаждения. Пирамидоподобная структура, полученная при растекании наноразмерной капли простого флюида с параметрами, отвечающими расплаву германия по подложке, воспроизводящей поверхность кремния (рис. 1 слева – вид сбоку, справа – вид сверху). Высокоэнергетические полосы, образующие сетку, воспроизводят в некотором приближении, границы зерен на поверхности кремния.

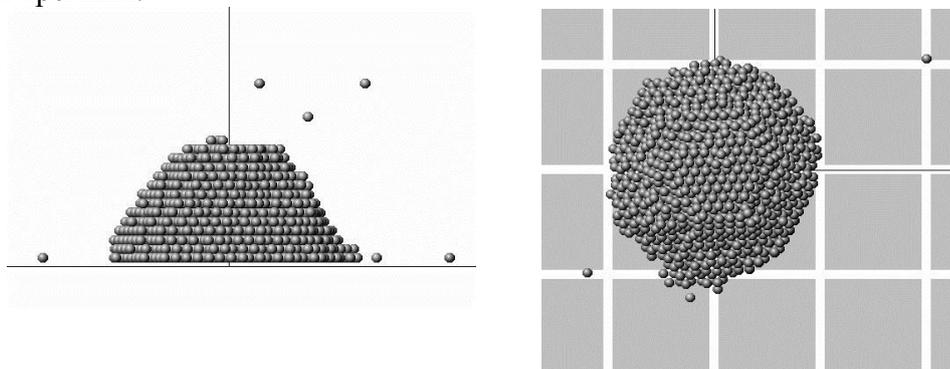


рис.1

Переход от модели простого леннард-джонсовского флюида к более сложным молекулам открывает дополнительные возможности для самоорганизации наноструктур. Наиболее интересными оказались результаты, отвечающие растеканию наноразмерных капель, представленных жесткими стержнеобразными молекулами. В таких системах обнаружена тенденция к формированию кластеров с параллельной ориентацией стержней. Кластеры, в свою очередь, формируют паркетную структуру в нижнем монослое капли, представленной жесткими стержнеобразными молекулами. (рис.2). Более подробно процессы структурообразования в системах из жестких стержнеобразных молекул рассмотрены в нашей работе [1]. Аналогичный эффект формирования доменов из стержнеобразных молекул в объемной фазе был обнаружен еще в конце 70-х гг. [2]. Однако этот эффект мог быть индуцирован использованием при молекулярно-динамическом моделировании периодически граничных условий.

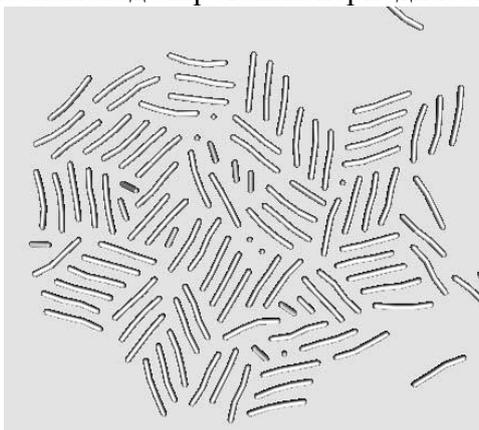


рис.2

Список публикаций:

- [1] Samsonov V. M. and Dronnikov V. V., *Colloids and Surfaces*, (2004, in print).
- [2] Першин В.К., Скопинов С.А., *ФТТ*, 21, 946-949 (1979).

Равновесие жидкость – пар в системе $UF_6 - IF_5 - BrF_3$ при температуре 353,15 К

Оствальд Роман Вячеславович

*Усов Владимир Фёдорович, Индык Денис Викторович, Пильчик Иван Викторович,
Ушаков Дмитрий Александрович, Гордиенко Сергей Владимирович*

Томский Политехнический Университет

Жерин Иван Игнатъевич к.х.н

trurom@mail.ru

Благодаря высокой фторирующей способности галогенфториды нашли широкое применение в современной ядерной технологии. Процессы фторирования весьма важны при получении делящихся материалов. Перспективно применение фторидов галогенов в технологии «сухой» переработки облучённого ядерного топлива (методы возгонки летучих фторидов). Другим перспективным направлением как фторирующих агентов является их использование для снятия урансодержащих отложений с поверхностей технологического оборудования [1]. Было показано, что применение синергетической смеси трифторида брома и гексафторида йода для фторирования урана и его соединений весьма целесообразно, реакция протекает практически полностью при пониженных давлениях и температурах. В результате процесса фторирования получается смесь, состоящая из гексафторида урана, трифторида брома и пентафторида йода, для разделения которой необходимо изучение физико-химических характеристик компонентов системы, а так же изучение фазовых равновесий.

Настоящая работа посвящена изучению фазового равновесия жидкость – пар в тройной системе $UF_6 - IF_5 - BrF_3$. Экспериментальная установка для изучения фазового равновесия статическим методом состоит из никелевой ёмкости с исследуемой системой. Ёмкость подсоединена к системе измерения давления, термостатирования, пробоотбора и эвакуирования. Подробная схема экспериментальной установки и методика проведения эксперимента приведена в [2]. Для исследования применяли трифторид брома, синтезированный из очищенных фтора и жидкого брома по методике, описанной в [3], и пентафторид йода, синтез которого описан в [2]. Гексафторид урана отвечал требованиям ТУ 95.260-74.

Для получения данных о фазовом равновесии во всём спектре составов тройной системы был выбран метод изменения состава по секущим. Суть его заключается в добавлении одного из компонентов к смеси двух других компонентов, соотношение концентраций которых постоянно и обозначается (a). Такой набор составов формирует одну секущую, исходящую из вершины, которая отвечает чистому гексафториду урана. При изучении равновесия в системе $UF_6 - IF_5 - BrF_3$ было исследовано десять секущих. Коэффициент a определяли соотношением (рис.1):

$$a = \frac{x_{IF_5}}{x_{BrF_3}} \quad (1)$$

Обработанные экспериментальные данные приведены на рис. 1. На рисунке построены изотермо-изобарические проекции сечений на плоскость треугольника составов системы $UF_6 - IF_5 - BrF_3$. На рис. 2 изображены зависимости давления насыщенного пара в системе от состава трёхкомпонентной смеси по секущим. Из рис. 2 видна тенденция перехода из области положительного отклонения систем $UF_6 - IF_5$ и

$UF_6 - BrF_3$ к системе с отрицательным отклонением $IF_5 - BrF_3$. До области пересечения изотерм ($x(UF_6)=0\div 0,11$) концентрация гексафторида урана настолько мала, что свойства тройной системы в большей степени определяются свойствами IF_5 и BrF_3 .

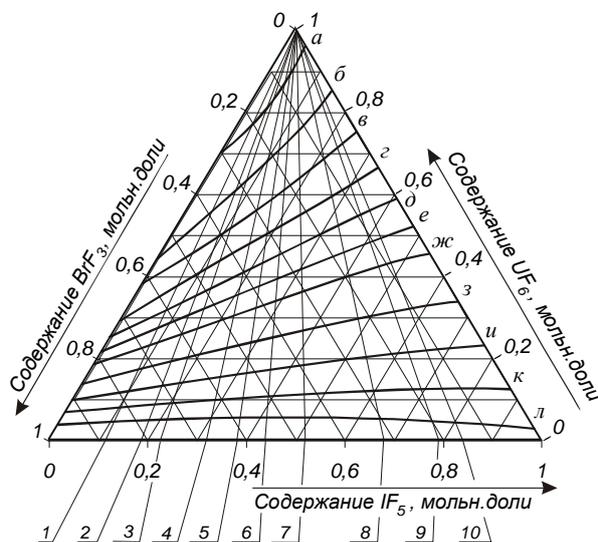


рис. 1

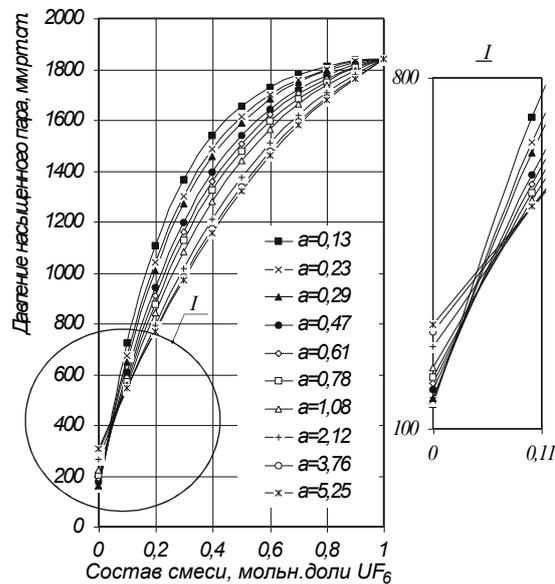


рис. 2

рис. 1. Проекция изотермо-изобарических сечений поверхности жидкости равновесия жидкость – пар в системе $UF_6 - IF_5 - BrF_3$ при 353,15 К

и различных давлениях, мм рт.ст.:

а) 1800; б) 1700; в) 1600; г) 1500; д) 1400; е) 1300;

ж) 1200; з) 1000; и) 800; к) 600; л) 400.

1) $a=0,13$; 2) $a=0,23$; 3) $a=0,29$; 4) $a=0,47$; 5) $a=0,61$;

6) $a=0,78$; 7) $a=1,08$; 8) $a=2,12$; 9) $a=3,76$; 10) $a=5,25$

рис. 2. Линии поверхности жидкости на сечениях в тройной системе $UF_6 - IF_5 - BrF_3$ при 353,15 К

Приведённые данные о фазовом равновесии показывают возможность применения методов дистилляции и ректификации для разделения системы $UF_6 - IF_5 - BrF_3$ при температуре 353,15 К. Результаты экспериментальной работы по изучению равновесия жидкость – пар могут быть использованы для дальнейшего расчёта дистилляционных процессов.

Список публикаций:

[1] Амелина Г.Н., Жерин И.И., Калайда Р.В., Тягельская А.М. Физико-химические свойства некоторых систем с гексафторидом урана и фторидами галогенов. Часть 1. Фазовые равновесия жидкость – твёрдое в системе трифторид брома – пентафторид йода. // Химическая технология. – 2003. – № 7. – С. 22-31.

[2] Жерин И.И., Амелина Г.Н., Оствальд Р.В. и др. Объемные свойства IF_5 и BrF_3 . Сообщение 1. Давление насыщенного пара пентафторида йода // Известия Томского политехнического университета. – 2002. – Т. 305. – Вып. 3. – С. 252–263.

[3] Амелина Г.Н., Гордиенко В.В., Жерин И.И. и др. Объемные свойства IF_5 и BrF_3 . Сообщение 2. Давление насыщенного пара пентафторида брома // Известия Томского политехнического университета. – 2002. – Т. 305. – Вып. 3. – С. 263–273.

[4] Walter B., Eberhard J. Uran. Verbindungen mit Fluor. – Gmelin Handbuch der Anorganischen Chemie /Trg/ – Bd. с 8.: Berlin, Spriger, 1980. – 301 s.

Инжекция перегретого пара в пористую среду
Рахматуллин Ильдар Раушанович
Бирский государственный педагогический институт
ildar_bash@rambler.ru

Тепловые методы разработки нефтяных месторождений являются одним из основных способов добычи высоковязкой, битумных и парафиновых нефтей. Последний вид нефти, при взаимодействии с холодным агентом приводит к выпадению из нефти парафина непосредственно в пористой среде. Термические методы воздействия на пористую среду основаны на резком снижении вязкости нефти при нагреве, что позволяет увеличить подвижность в пористой среде. Наиболее эффективным и экономичным теплоносителем является водяной пар. У водяного пара относительно высокая способность смачивать поверхность пористой среды. В результате этого пар проникает в самые мелкие поры среды и вытесняет из них нефть, то есть большое число пор участвуют в процессе фильтрации. Кроме того, с помощью закачки пара можно очистить коллектора от склеротических бляшек, образовавшегося за счет отложений твердой фазы (парафинов, газогидратов и льдинок, например) на стенки пористой среды. Однако целесообразнее нагнетать в пористую среду более активные теплоносители, способные существенно повысить температуру пористой среды. Установлено, что одним из таких эффективным рабочим агентом является перегретый пар, которое можно использовать при тепловых методах разработки в зависимости от глубины залегания пористой среды и давления в них. Рассмотрена радиально-симметричная задача об инъекции перегретого пара в пористую среду без учета эффектов связанных с тепловым разрушением твердой фазы. Для описания процессов фильтрации и тепломассопереноса при закачивании перегретого пара в пористую среду, насыщенным газом, примем следующие допущения. Будем полагать, что скелет пористой среды несжимаем и неподвижен, пористость постоянна. При инъекции перегретого пара в пористой среде образуется четыре зоны. Первая зона, примыкающая к скважине, в которой фильтруется перегретый пар. Вторая зона – зона фильтрации насыщенного пара. Третья водонасыщенная зона, разделяющие зоны фильтрации газа и пара. Четвертая, дальняя зона, в которой фильтруется исходный газ, насыщающий пористую среду. Эффектами связанными с фазовыми переходами в самом скелете пористой среды будем пренебрегать.

В рамках принятых допущений во всех зонах запишем уравнения сохранения массы, уравнение притока тепла, для процесса фильтрации примем закон Дарси. Процесс фильтрации насыщенного пара происходит в равновесном режиме (скорости, температуры капелек и пара одинаковы и в зоне фильтрации насыщенного пара выполняется уравнение Клапейрона – Клаузиуса). Для перегретого и насыщенного пара, а также для газа примем уравнение Менделеева – Клапейрона, а воду будем считать несжимаемой. Для средней плотности влажного пара можем записать:

$$\frac{1}{\rho_{lv}} = \frac{\varphi}{\rho_l} + \frac{(1-\varphi)}{\rho_v},$$

где φ влагонасыщенность насыщенного пара.

Эти уравнения, дополним соотношениями на поверхности фазового перехода ($r=r(s)$), следует из закона сохранения массы и из условия теплового баланса. Наряду с

фронтом фазового перехода, введена также контактная граница ($r=r_{(m)}$), которая находится между фильтрацией жидкости и газа.

Данная задача решалась в автоматической постановке, что значительно облегчает решение поставленной задачи. Рассматриваемая автоматическая задача сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений с краевыми условиями на $\xi = 0$ и $\xi = \infty$, соответствующими граничным и начальным условиями. В этой задаче возникает ещё три промежуточные границы, соответствующие границе насыщения, границе фазового перехода и контактной границе. Данная краевая задача с неизвестной автоматической координатой границы насыщения $\xi_{(n)}$, границы фазового перехода $\xi_{(s)}$ и контактной границей $\xi_{(m)}$ решалась численно методом пристрелки.

На основе анализа решений можно сделать следующие выводы:

1. С увеличением массового расхода перегретого пара, зона прогретой области распространяется дальше.
2. Толщина слоя жидкости зависит от коэффициента проницаемости, граничной температуры и массового расхода пара.
3. В зоне фильтрации насыщенного пара, а также в зоне фильтрации газа давление и температуру можно считать постоянным, так как основной перепад давления и температуры происходит в зоне фильтрации перегретого пара и жидкости.

Влияние конечной скорости на асимптотическое распределение частиц в процессе аномальной диффузии

Саенко Вячеслав Владимирович

Учайкин Владимир Васильевич

Ульяновский государственный университет

saenkoslava@mail.ru

Под термином аномальной диффузии понимаются диффузионные процессы, в которых ширина диффузионного $\Delta(t)$ пакета растет со временем t по закону

$$\Delta(t) \propto t^\gamma, \quad \gamma > 0.$$

В зависимости от показателя γ мы получаем различные режимы диффузии. Значение $\gamma = 1/2$ соответствует нормальной диффузии, при $\gamma < 1/2$ пакет расплывается медленнее чем в нормальной случае, и мы получаем субдиффузию, а при $\gamma > 1/2$ пакет расплывается быстрее, чем в случае нормальной диффузии, и мы получаем супердиффузию. Модель аномальной диффузии: Continuous Time Random Walk (CTRW) [1], описывает асимптотическое поведение (при $t \rightarrow \infty$) плотности распределения частиц. В этой модели предполагается, что частица может находиться в двух, последовательно сменяющих друг друга состояниях: состоянии движения и состоянии покоя. Причем, перемещение частицы из одной точки в другую происходит мгновенно. Плотности распределения пробегов $\rho(\xi)$ и времен покоя $\eta(\tau)$ имеют вид

$$\rho(\xi) \propto \alpha \xi_0^\alpha \xi^{-\alpha-1}, \quad \xi \rightarrow \infty, \quad 0 < \alpha < 2; \quad \eta(\tau) \propto \beta \tau_0^\beta \tau^{-\beta-1}, \quad \tau \rightarrow \infty, \quad 0 < \beta < 1.$$

Модель с мгновенным изменением координаты подходит, для описания блужданий в энергетическом пространстве, когда в результате столкновений энергия нейтрона или любой другой элементарной частицы мгновенно изменяется на некоторое значение. Если мы будем рассматривать перенос вещества в пространстве, то здесь атомы вещества могут перемещаться лишь с конечной скоростью, и ни о каком мгновенном перемещении речи быть не может.

В данной работе рассматривается аномальный перенос вещества, в рамках модели СТРУ, в которой между двумя последовательными состояниями покоя, частица перемещается с конечной скоростью v . Исследуется влияние конечной скорости на асимптотическую плотность распределения частиц. В результате проведенного анализа методом Монте-Карло, получены следующие результаты. При супердиффузии, когда $\alpha \in (1,2]$ и времена покоя распределены по показательному закону, учет конечной скорости сводится к замене коэффициента диффузии $C \rightarrow C_v = (1 + M\xi / (vM\tau))^{-1}$ в уравнении супердиффузии [2], где $M\xi$ – математическое ожидание пробега, а $M\tau$ – математическое ожидание времени покоя. Причем, асимптотическое решение кинетического уравнения совпадает с точным решением уравнения супердиффузии $p(x,t)$, которое выражается через плотность устойчивого закона $g(x; \alpha, \theta)$

$$p(x,t) = (C_v t)^{-1/\alpha} g(x(C_v t)^{-1/\alpha}; \alpha, \theta).$$

При $\alpha \in (0,1]$ решения кинетического уравнения и уравнения супердиффузии имеют разные асимптотики. Для случая $\alpha < 0.6$ получена аппроксимация формы диффузионного пакета (рис.1)

$$\psi(\zeta) = \frac{\Gamma(2/3 - \sigma)}{\sqrt{\pi}\Gamma(1 - \sigma)} \frac{1}{(1 - \zeta^2)^\sigma}, \quad \sigma = \frac{2 - 3\alpha}{2(1 - \alpha)}, \quad \zeta \in (-1,1). \quad (1)$$

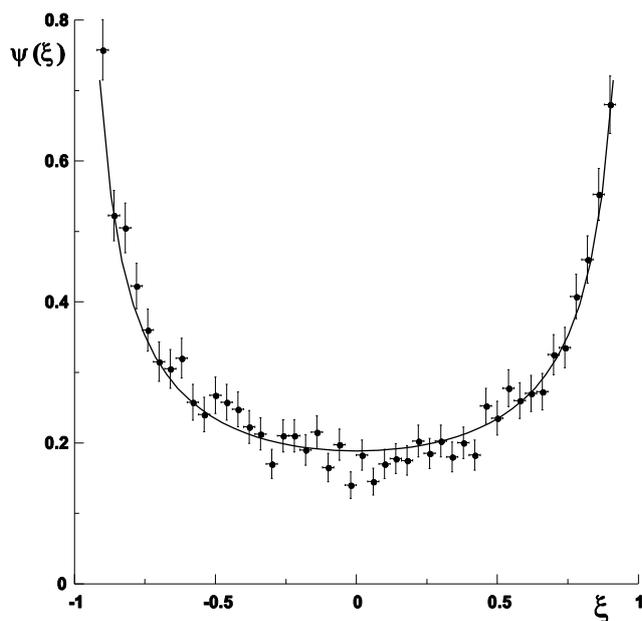


Рис. 1. Асимптотическое распределение частиц для супердиффузии при $\alpha = 0.33$, $\beta = 1$ и $\nu = 1$. Точки – результаты Монте-Карло, сплошная линия – аппроксимация (1).

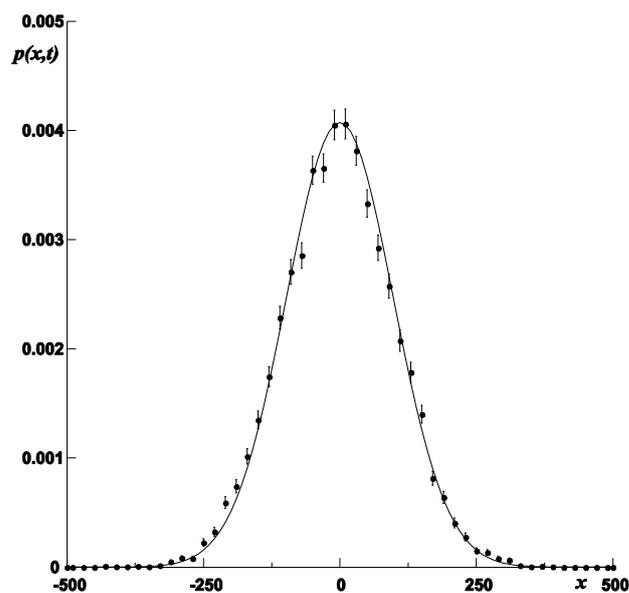


Рис. 2. Асимптотическое распределение в случае субдиффузии $\alpha = 2$, $\beta = 1.5$, $\nu = 3$. Точки – результаты Монте-Карло, сплошная кривая – распределение Гаусса с коэффициентом диффузии C_ν .

В случае субдиффузии, когда среднее время покоя бесконечно ($\beta \in (0,1)$), учет конечной скорости никак не влияет на асимптотическое распределение частиц, т.е. асимптотическое решение кинетического уравнения совпадает с точным решением уравнения субдиффузии $p(x,t)$, и выражается через плотности дробно-устойчивых распределений $q(x; \alpha, \beta, \theta)$

$$p(x,t) = (Ct^\beta)^{1/2} q\left(|x|(Ct^\beta)^{-1/2}; 2, \beta, \theta\right), \quad \beta \leq 1.$$

Если среднее время покоя частицы существует, то учет влияния конечной скорости сводится к изменению (уменьшению) коэффициента диффузии в уравнении субдиффузии с C на C_ν , а само распределение частиц будет описываться распределением Гаусса (рис.2).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 03-01-00163).

Список публикаций:

[1] Ralf Metzler, Joseph Klafter, *Physics Reports*, **339**, 1-77 (2000).

[2] Золотарев В. М., Учайкин В. В., Саенко В. В., *ЖЭТФ*, **115**, 1411-1425 (1999).

[3] Бенинг В. Е., Королев В. Ю., Сухорукова Т. А., Гусаров Г. Г., Саенко В. В., Учайкин В. В., *Стохастические модели структурной плазменной турбулентности*, МГУ, ВМК, 291-360 (2003).

Детализированное исследование параметров детонационной волны в молекулярном кристалле при помощи метода молекулярной динамики.

Уткин Андрей Вячеславович

Институт Теоретической и Прикладной Механики СО РАН

Головнев Игорь Федорович, к.ф.-м.н

Фомин Василий Михайлович

utkin@itam.nsc.ru

Важнейшей фундаментальной проблемой механики является механизм зарождения и перехода горения в детонацию как в газообразных, так и в конденсированных средах. Экспериментальные исследования химических реакций, структуры детонационных и ударных волн связаны со значительными трудностями вызванными, во-первых, их высокой интенсивностью и, во-вторых, масштабами явлений, как во времени (наносекунды) так и в пространстве (порядка ста ангстрем) и в настоящее время имеются только первые результаты в этой области [1]. Следует заметить, что также отсутствует строгая кинетическая теория явлений в твердых взрывчатых веществах при наличии химических реакций. В связи с этим одним из возможных способов исследования тонкой структуры волновых процессов является метод молекулярной динамики, в рамках которого имеется наиболее полная информация о системе (набор обобщенных координат и импульсов всех атомов). Это позволяет, при корректном осреднении по мезообъемам, в которых можно предполагать наличие локального термодинамического равновесия, получить параметры, используемые в континуальной механике.

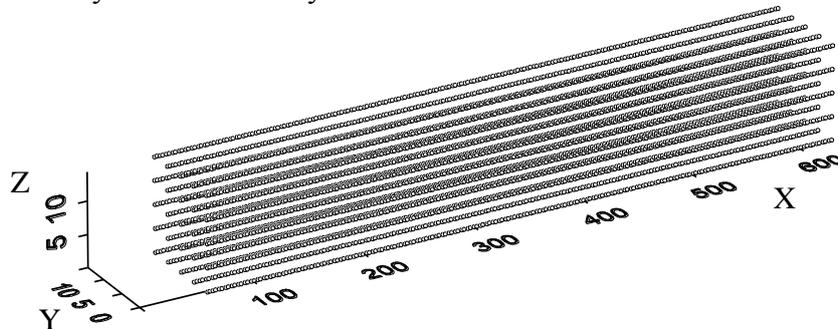


рис.1

Целью данной работы является изучение влияния поперечного размера образца на характер процессов происходящих в молекулярном кристалле (скорость распространения детонационной волны, время зарождения химической реакции и энергетические макрохарактеристики в возмущенной области). В представленном исследовании также уделяется внимание сравнению результатов молекулярно-динамического моделирования с предсказаниями континуальной теории детонации, в частности проверка выполнения условия Чепмена-Жуге. В качестве физической системы рассматривался трехмерный гипотетический молекулярный кристалл, допускающий протекание экзотермических реакций (см. рис.1). Инициация реакции осуществлялась импульсом внешней силы, который воздействует на левую грань кристалла в течение определенного временного интервала. В численном эксперименте кристалл помещался в адиабатическую оболочку, которая ограничивает разлет

продуктов детонации в плоскости перпендикулярной распространению детонационной волны. Этот вариант интересен тем, что позволяет свести трехмерную задачу в данной постановке на микроуровне к одномерной задаче континуальной теории детонации. Детальное описание потенциалов межатомного взаимодействия и математической модели приводится в работе [2].

Список публикаций:

[1] Aleshaev A.N., Batrakov A.M., Fedotov M.G., G.N.Kulipanov, L.A.Luckjanchikov et al., *Nucl. Instr. And Meth.*, A470, 240-244 (2001).

[2] Fomin V.M., Golovnev I.F., Utkin A.V., *Shock Waves.*, V.13, N2., 155-165 (2003).

Рост газогидратных отложений в пористой среде

Хасанов Марат Камирович

Стерлитамакский Государственный Педагогический Институт

Шаганов Владик Шайхулагамович, д.ф.-м.н

marat_sgpi@mail.ru

Газовые гидраты—твёрдый кристалл, образующийся соединением молекул воды и газа при определенных давлениях и температурах.

В общем случае процесс гидратообразования определяется двумя факторами: массопередачей (поступлением воды и газа в область гидратообразования) и теплопередачей (отводом тепла из области фазовых переходов). При хорошей растворимости газа в воде данный процесс лимитируется теплопередачей, в противном случае—массопередачей.

Пусть газ мало растворим в воде, тогда при выполнении необходимых термобарических условий на границе контакта газа и жидкости возникает твердая газогидратная корка, препятствующая поступлению газа к поверхности жидкости. В этом случае процесс гидратообразования лимитируется диффузией в газогидрате.

Примем, что в начальный момент времени пористая среда насыщена газом и жидкостью, причем жидкость смачивает породу и покрывает ее в виде пленки равномерной толщины, а температура установилась ниже равновесной температуры гидратообразования для данного давления.

Приняты следующие допущения:

- 1) содержание газа-гидратообразователя в жидкой фазе, а также паров воды в газе пренебрежимо мало;
- 2) жидкость несжимаема и неподвижна;

Интенсивность гидратообразования на единицу площади связана стехиометрическим условием с потоком газа к границе между жидкостью и газогидратом. Диффузия газа в газогидрате описывается законом Фика; концентрации газа на межфазных границах находятся из диаграмм фазового равновесия системы вода-гидратообразователь.

Получено аналитическое решение для скорости роста газогидратных отложений; оценено время, необходимое для полного перехода воды в газогидрат.

Молекулярные свойства дендронизированных полимеров

Хорошавцева Вероника Юрьевна

Лезов Андрей Владимирович

Полушина Галина Евгеньевна

Филиппов Сергей Константинович

Санкт-Петербургский Государственный Университет

Лезов Андрей Владимирович, д.ф.-м.н

veronikk@mail.ru

Дендронизированные полимеры (рис.1) относятся к новому классу высокомолекулярных соединений, молекулы которых обладают сложной разветвленной структурой. Интерес к синтезу и изучению их физико-химических свойств обусловлен широкими возможностями их практического применения для создания новых функциональных материалов, а также необходимостью развития фундаментальных представлений о структуре и свойствах сложноразветвленных макромолекул.

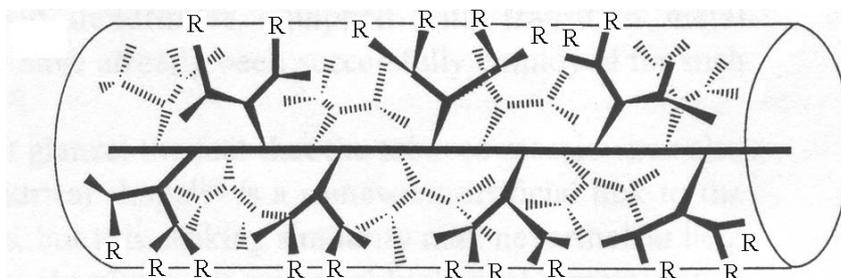


рис. 1

Молекулы дендримеров состоят из регулярно разветвленных деревоподобных блоков – дендронов. Два или более дендронов могут быть присоединены друг к другу через один центральный атом, или быть включены в состав повторяющихся звеньев полимерных молекул, образуя дендронизированный полимер. Возможность присоединения к концевым группам молекул дендримеров функциональных фрагментов различной природы, позволяет направленно регулировать физико-химические свойства этих соединений.

В настоящей работе методами вискозиметрии и динамического рассеяния света (ДРС) были исследованы молекулярные свойства дендронизированных полимеров 1 – 4 генерации в тетрагидрофуране и хлороформе. Были определены коэффициенты диффузии, характеристические вязкости, и по полученным данным вычислены молекулярные массы исследованных объектов. Степень полимеризации образцов дендронизированного полистирола (ПСД) 1 – 4 генерации оказалась близкой к (1100 ± 200) . Установлено, что гидродинамический радиус макромолекул ПСД возрастает с увеличением номера генерации присоединенного дендрона, что в значительной степени вызвано увеличением равновесной жесткости (длина сегмента Куна A) молекул.

Физико-химические свойства сплава Pd-18ат.%Si в жидком состоянии

Ягодин Денис Анатольевич

Сивков Григорий Михайлович, Кофанов Сергей Анатольевич

Уральский Государственный Педагогический Университет

Сидоров Валерий Евгеньевич, д. ф-м. н

DYagodin@yandex.ru

Сплавы на основе Pd-Si интересны как в научном, так и в практическом плане. В первом случае их используют в качестве модельных сплавов при анализе условий аморфизации и релаксации металлических стекол. Во втором случае, благодаря хорошим механическим и акустическим свойствам, из этих сплавов изготавливают различные упругие чувствительные элементы для механических измерительных приборов. В последние годы начато широкое применение данных сплавов в качестве паяльной и сварочной фольги для соединения деталей турбин реактивных двигателей, теплообменников и пайки различных ювелирных изделий. Сейчас, в связи с резким падением цен на палладий, сплавы на его основе, как в аморфном, так и в кристаллическом состоянии могут стать довольно перспективными материалами в различных отраслях промышленности.

Система Pd-Si имеет диаграмму состояния с эвтектическими точками и различными химическими соединениями. Эти особенности могут приводить к образованию микронеоднородностей в её расплавах, которые проявляются при измерении структурно-чувствительных свойств.

Изучаемый в данной работе заэвтектический сплав (Pd-18ат.%Si) весьма удобен при проведении экспериментов, так как он инертен по отношению к окислителям и плавится при сравнительно небольшой температуре. Из литературных источников известно, что этот сплав хорошо аморфизируется при скоростях охлаждения $\sim 10^6$ К/с, поэтому изучение его физико-химических свойств важно для разработки технологических режимов получения аморфных лент. В частности, вязкость является определяющим критерием перехода расплава из жидкого состояния в аморфное.

Задачей исследования было изучение влияния перегрева расплава над ликвидусом на его структурное состояние. В работе получены температурные зависимости вязкости, скорости ультразвука и коэффициента его поглощения в расплаве Pd-18ат.%Si. Вязкость определяли методом затухающих крутильных колебаний тигля с расплавом. Измерения проводили в цилиндрических тиглях из оксида бериллия в инертной атмосфере гелия под давлением 1,1 атм. Результаты двух последовательных экспериментов с одним образцом представлены на рисунке 1. Совпадение абсолютных значений вязкости в пределах экспериментальной погрешности метода ($\sim 3 - 5$ %) для различных экспериментов, достоверно указывает на наличие гистерезиса вязкости при нагреве и охлаждении в первом эксперименте, причём ветвление политерм начинается в районе 1100 °С. При повторном нагреве образца гистерезиса свойства не наблюдается, что свидетельствует о гомогенности расплава, то есть отсутствии каких либо необратимых превращений, подобных тем, что произошли при первом нагреве.



рис.1

Скорость ультразвука измеряли импульсно-фазовым методом, который позволяет определять скорость распространения ультразвукового возмущения v_s с погрешностью не более 0,2 %, и коэффициента поглощения ультразвука. Для получения качественного акустического контакта между кварцевым звукопроводом и расплавом использовали тонкий слой борного ангидрида. Все исследования проводили на частоте 31,33 МГц. Достоинством указанной методики является возможность определения скорости ультразвука в зависимости от вертикальной координаты вдоль тигля. Измерения проводили в инертной атмосфере гелия, в кварцевой ячейке соединённой с нижним звукопроводом посредством конусного шлифа.

Политермы скорости ультразвука и коэффициента поглощения получены в интервале температур 950 – 1185 °С, с шагом 25 °С при нагреве и 50 °С при охлаждении (рис.2). Изотермическая выдержка в каждой точке составляла не менее 40 минут. При каждой температуре исследовали зависимость скорости ультразвука от высоты, обнаружено возрастание скорости звука вблизи дна тигля. Наличие значительного гистерезиса на политерме скорости ультразвука указывает на происходящие в расплаве процессы перестройки структуры. Подобный гистерезис был получен нами и при измерении плотности указанного сплава. Подробное описание результатов дано в работе [1].

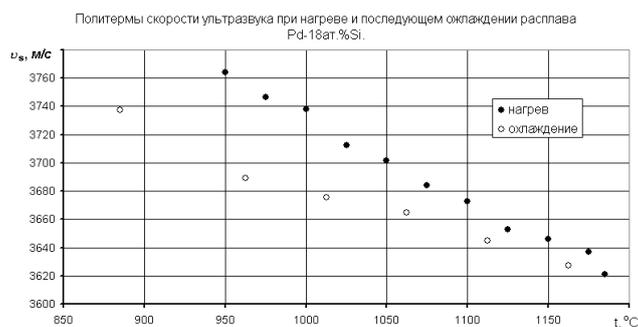


рис.2

В дальнейшем, продолжением этой работы будет изучение влияния гомогенизирующего перегрева расплава на структуру и свойства полученных из него аморфных лент. Мы считаем, что наши результаты могут послужить основой для разработки технологии производства аморфных лент со стабильными, повышенными служебными характеристиками.

Список публикаций:

[1] Г. М. Сивков, Д. А. Ягодин, С. А. Володин, П. С. Попель. Необратимые изменения плотности расплава Pb – 15,5 ат. % Si при его нагреве. Сборник тезисов докладов второй Всероссийской научно-технической конференции. УГТУ-УПИ, Екатеринбург, 2003, с 62-63.

Расчет взаимодействия простых молекул с анионами поверхности ионных адсорбентов

Янко Виталий Сергеевич

Сторожев Павел Юрьевич

Цыганенко Алексей Алексеевич, д. ф.-м. н

Санкт-Петербургский государственный университет

vital@photonics.phys.spbu.ru

Поверхностные ионы твердых тел создают электростатические поля, действующие далеко за пределами поверхности. Взаимодействие этих полей с молекулами оказывает сильное влияние на строение и свойства адсорбционных комплексов, что, в свою очередь может определять механизм каталитических реакций, в том числе имеющих промышленное применение. Адсорбция простых молекул может быть описана в рамках простой электростатической модели, как это было сделано с нашим участием в работе [1]. Было показано, что эта модель неплохо предсказывает геометрию, энергетику и особенности ИК-спектров поляризуемых молекул, взаимодействующих с катионами или протонами ОН-групп поверхности цеолитов. Попытки учесть влияние окружающих атомов кислорода показали, что анионы поверхности сами могут выступать в качестве центров адсорбции, иногда даже более сильных, чем катионы. В связи с этим в данной работе была поставлена задача получить с помощью электростатической модели информацию о геометрии, энергетике и спектральных проявлениях адсорбционных комплексов с поверхностными анионами, оксидов и цеолитов на примере молекул СО, азота и водорода, и сравнить результаты расчета с имеющимися экспериментальными данными.

Рассмотрение взаимодействия поляризуемой молекулы с зарядом дает простое выражение для энергии адсорбции: $E_{\text{ads}} = \frac{1}{2}\alpha_{\parallel}F^2 \pm \mu_{\parallel}F$, зависящее лишь от напряженности поля F и компонент поляризуемости α_{\parallel} и дипольного момента μ_{\parallel} молекулы адсорбата вдоль поля. Поскольку для линейных молекул $\alpha_{\parallel} > \alpha_{\perp}$, устойчивыми оказываются только линейные конфигурации. Изменение знака заряда в этом приближении меняет только предпочтительную ориентацию молекулы, если ее дипольный момент отличен от нуля. Так, если для молекулы СО, взаимодействующей с катионом М, модель предсказывает две устойчивые конфигурации М-СО и М-ОС, из которых первая более выгодна, с анионом можно было бы ожидать предпочтительного образования другой, кислородно-связанной формы. Этого, однако, не наблюдается, а вычисленные значения энергии адсорбции в этом приближении оказываются сильно заниженными, что указывает на необходимость учета квадрупольного момента молекулы.

При учете ион-квадрупольного взаимодействия, определяющими становятся величина и знак квадрупольного момента молекулы: $E_{\text{ads}} = \frac{1}{2}\alpha_{\parallel}F^2 \pm \mu_{\parallel}F - \theta \frac{\partial F}{\partial R}$. Эта формула лучше воспроизводит экспериментальные значения энергии адсорбции N₂ и СО на катионах, однако взаимодействие квадрупольного момента с анионом оказывается отталкивательным, делая невозможным образование линейных комплексов с ионами кислорода. Выгодной оказывается поперечная конфигурация с энергией определяемой по формуле $E_{\text{ads}} = \frac{1}{2}\alpha_{\perp}F^2 + \frac{1}{2}\theta \frac{\partial F}{\partial R}$.

Знак квадрупольного момента молекулы водорода отрицателен, что делает значительно более выгодным образование линейного комплекса с анионами, тогда как

с катионами, в согласии с более ранними работами, образуются комплексы с поперечной ориентацией молекулы.

Результаты расчетов энергии адсорбции для азота и водорода сведены в таблице, где приведенные значения относятся к энергетически выгодным конфигурациям: линейной для комплексов N_2 - катион и H_2 - анион, и поперечной для N_2 - анион и H_2 - катион. Расстояние между партнерами включало приведенные значения радиуса катионов (по Полингу), а приведенные значения эффективного заряда катионов заимствованы из [2].

ИОН	Na^{+q}	K^{+q}	Cs^{+q}	O^{-q}		
$r_{иона}, \text{Å}$	0,98	1,38	1,69	1,44	1,44	1,76
$q_{иона}, \text{a.e.}$	0,82	0,86	0,89	-2,0	-1,5	-1
$E_{адс.}(N_2), \text{кДж/моль}$	2,0	1,2	0,9	1,3	1,0	0,5
$E_{адс.}(H_2), \text{кДж/моль}$	6,6	4,6	3,6	20,9	15,4	7,6

Как видно из таблицы, энергия взаимодействия азота с анионом кислорода, имеющим эффективный заряд $-1,5$, примерно соответствующий заряду на кислорode решетки цеолитов с высоким содержанием алюминия, превосходит энергию линейных комплексов с катионами цезия. В то же время, для водорода связывание с анионами O^{-1} оказывается выгоднее образования комплексов даже с катионом натрия.

Для изоэлектронных молекул азота и CO величины энергии адсорбции на катионах оказываются близки, при этом для CO теория предсказывает наблюдаемую в эксперименте изомерию связывания и боковое связывание молекул CO с основными атомами кислорода. Теория объясняет также разные знаки сдвигов частот для CO, связанного с катионами через атомы C и O, позволяет оценить барьер, препятствующий CO-OC-перевороту на поверхности, и предсказывает уменьшение коэффициента адсорбции для комплексов M-CO в сильных поверхностных полях.

Квантово-химические расчеты, проведенные для комплексов CO, N_2 и H_2 с катионом Na^+ , а также анионом F^- [3], который может рассматриваться как модель кислорода решетки цеолита, подтверждают предсказания электростатической модели о геометрии адсорбционных комплексов.

Совокупность полученных результаты позволяет нам сделать вывод о том, что для более корректных представлений об адсорбции на ионных поверхностях необходимо учитывать взаимодействие молекул с анионными центрами.

Разработанная электростатическая модель, учитывающая ион-дипольное и ион-квадрольное взаимодействия, достаточно точно воспроизводит величины энергии адсорбции, полученные из эксперимента, и позволяет предсказать геометрию комплексов, возникающих на анионных центрах, а также сделать выводы об изменении частот и интенсивностей в спектрах молекул при адсорбции. Квантово-химические расчеты подтверждают результаты, полученные с помощью электростатики.

Список публикаций:

- [1]. P. Yu. Storozhev, V. S. Yanko, A. A. Tsyganenko, G. Turnes Palomino, M. Rodríguez Delgado, C. Otero Areán. *Applied Surface Science*, в печати.
 [2] Ferrari A.M., Neyman K.M. and Roesch N. J. *Phys. Chem. B*, 1997, vol. 101, N 45, 9292-9298.
 [3] A.I. Boldyrev, Jack Simons, G.V. Mil'nikov, V.A. Benderskii, S.Yu. Grebenshchikov, and E.V. Vetoshkin, *J. Chem.Phys.*, **102** (3), 1295-1305.