

1. Важнейшие результаты фундаментальных исследований, полученные по направлению Программы Ш.18 в 2016 году

Свойства плоской межфазной границы кристалл-газ

В.Г. Байдаков, А.О. Типеев, К.Р. Проценко

Многие физико-химические процессы: катализ, адсорбция, смачивание, адгезия, флотация протекают на поверхности твердых тел. Для их описания необходимо знать свойства межфазной границы кристалл-газ, которые невозможно непосредственно измерить в эксперименте. Нами методом молекулярной динамики рассчитаны поверхностная энергия u и поверхностное натяжение τ на кристаллографических плоскостях (100), (110), (111) леннард-джонсовского ГЦК кристалла в интервале температур от абсолютного нуля до температуры тройной точки T_t . В рамках динамической теории кристаллической решетки в классическом приближении определена поверхностная энтропия s при $T=0$. Методом термодинамического интегрирования от $T=0$ рассчитана температурная зависимость поверхностной свободной энергии γ вдоль линии фазового равновесия кристалл-газ. Установлено, что $\gamma(T)$ является убывающей функцией температуры, причем $\gamma_{(110)} > \gamma_{(100)} > \gamma_{(111)}$. Величина и знак τ демонстрируют сильную зависимость от кристаллографической ориентации, анизотропия величин u , s , γ не превышает 10 %. Обнаружено изменение характера зависимостей $u(T)$, $s(T)$, $\gamma(T)$ вблизи температуры конечной точки линии плавления T_K , связанное с явлением поверхностного предплавления.

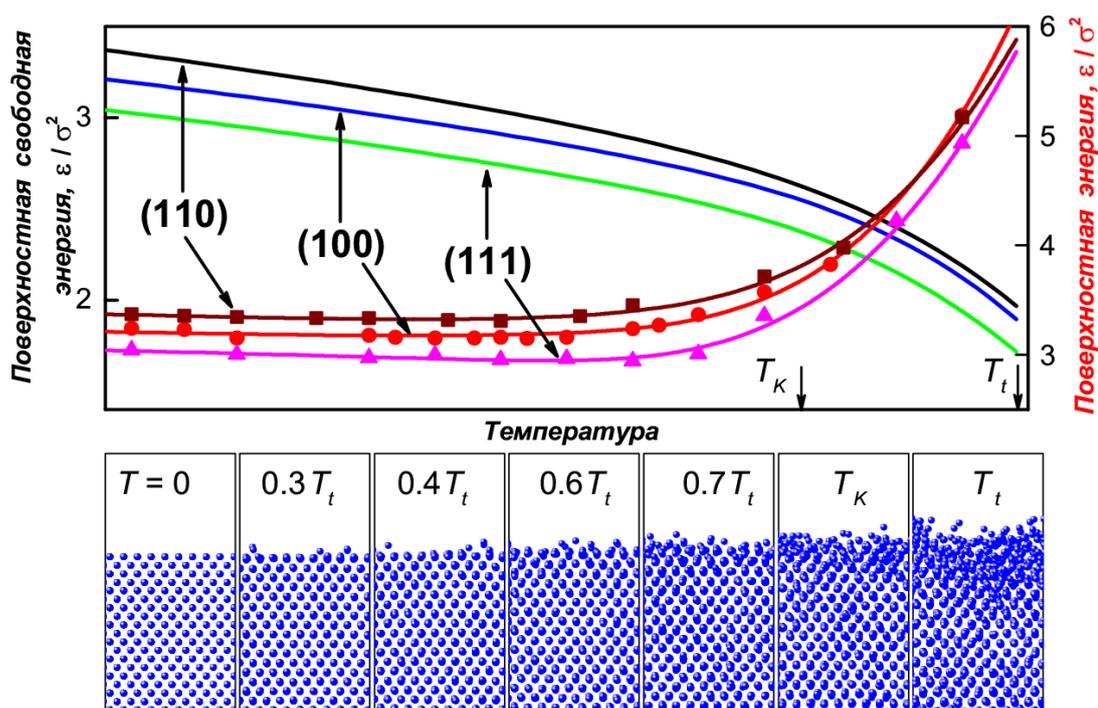


Рис.1. Температурная зависимость поверхностной свободной энергии и поверхностной энергии леннард-джонсовского ГЦК

Испарение жидкости с предельно перегретой межфазной поверхностью

П.А. Павлов

Разработан метод расчета плотности потока пара от межфазной поверхности, предельно перегретой выше температуры равновесного парообразования. Метод, основан на теории ударной волны. Ударная волна в результате специальной процедуры «прикрепляется» к поверхности жидкости. Метод проверен расчетами режимов с неограниченным теплопереносом к межфазной поверхности. Такие режимы наблюдаются вблизи линии трехфазного контакта жидкости с металлическими раскаленными конструкциями (рис.2), в режимах взрывного испарения при джоулевым перегреве струй (рис.3), а также при испарении жидкости с нулевой эффективной теплотой парообразования в области состояний вблизи спинодали (рис.4). Метод применяется для расчета температурных и тепловых полей в быстрых процессах, сопровождаемых взрывным вскипанием и взрывной кавитацией и для расчета реакции отдачи потока пара.

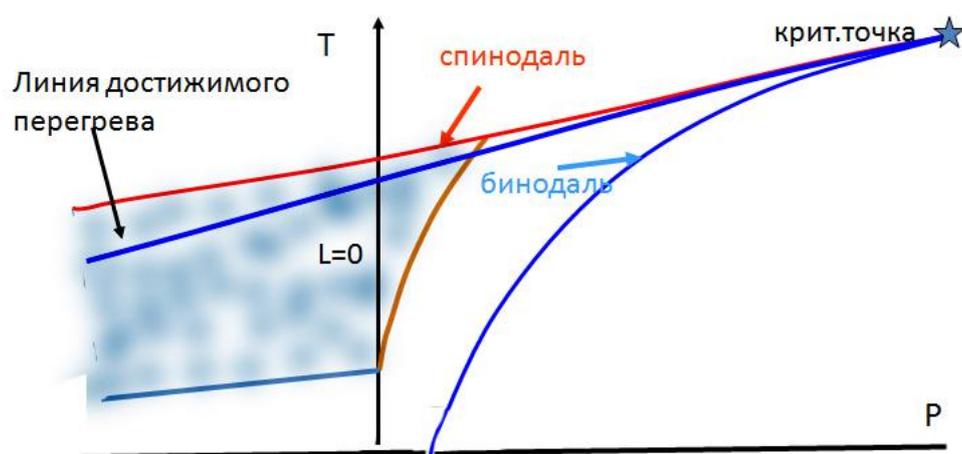
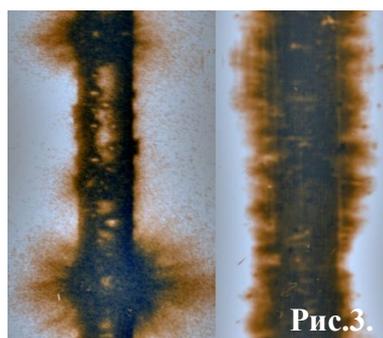


Рис.4. Помечена область состояний, в которых теплота парообразования скомпенсирована запасенным теплом перегретой жидкости. Её эффективная величина L равна нулю.

2. Важнейшие результаты выполнения прикладных научно-исследовательских работ по направлению Программы Ш.18 за 2016 год

Теплофизические свойства компонентов биодизельного топлива

Е.Д. Никитин, А.П. Попов, Н.С. Богатищева, М.З. Файзуллин

Выполнено комплексное исследование теплофизических свойств компонентов биодизельного топлива. Биодизельное топливо является возобновляемым источником энергии и обладает рядом преимуществ по сравнению с топливом, произведенным из нефти. Сведения о теплофизических свойствах биодизельного топлива необходимы для разработки технологий его производства и расчетов процесса горения в двигателе. Измерены критическая температура, критическое давление, температуропроводность и теплоемкость ряда метиловых и этиловых эфиров жирных насыщенных и ненасыщенных кислот (компоненты биодизельного топлива) и триглицеридов *n*-алкановых кислот (исходное сырье). Разработаны уравнения для прогнозирования теплофизических свойств указанных веществ. Рассчитаны ацентрические факторы исследованных соединений. Сформулированы рекомендации об использовании аддитивно-групповых методов для оценки критических параметров компонентов биодизельного топлива.

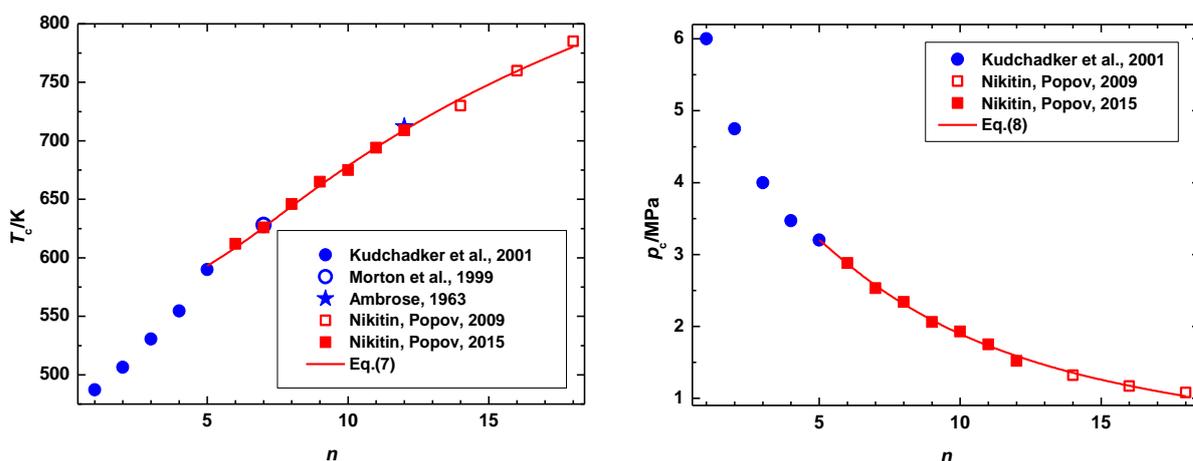


Рис.5. Критическая температура T_c и критическое давление p_c метиловых эфиров *n*-алкановых кислот $C_nH_{2n-1}O_2CH_3$ в зависимости от числа атомов углерода в материнской кислоте.

