

На правах рукописи



ШЕРИЕВА ЭЛЬВИРА ХУСЕНОВНА

**ВЛИЯНИЕ АДСОРБЦИИ КОМПОНЕНТОВ НА ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ
РАСПЛАВОВ БИНАРНЫХ СИСТЕМ С УСТОЙЧИВЫМИ ХИМИЧЕСКИМИ
СОЕДИНЕНИЯМИ ТИПА A_nB_m**

01.04.07 Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

НАЛЬЧИК 2020

Работа выполнена на кафедре теоретической и экспериментальной физики института физики и математики ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова» в г. Нальчике.

Научный руководитель:

Калажоков Хамидби Хажисмелович,
доктор физико-математических наук, профессор
кафедры теоретической и экспериментальной
физики ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарского
государственного университета им. Х.М.
Бербекова» г. Нальчик.

Официальные оппоненты:

Саввин Владимир Соломонович,
доктор физико-математических наук, профессор
кафедры общей и специальной физики Обнинский
институт атомной энергетики – филиал ФГАОУ
ВО «Национальный исследовательский ядерный
университет «МИФИ» г. Обнинск.

Сдобнякова Николая Юрьевича,
кандидат физико-математических наук, доцент
кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской
государственный университет» г. Тверь.

Ведущая организация:

ФГБОУ ВО «Чеченский государственный
университет» (ЧГУ) г. Грозный.

Защита состоится «14» декабря 2020 года в 16 часов 30 минут на заседании Диссертационного совета Д.212.076.02 в ФГБОУ ВО Кабардино-Балкарском государственном университете им. Х. М. Бербекова по адресу: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173, зал заседаний диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова и на сайте <http://diser.kbsu.ru>.

Автореферат разослан «09» октября 2020 года.

Ученый секретарь диссертационного совета
Д. 212.076.02 д.ф.-м.н., профессор



А. А. Ахкубеков

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Одним из методов определения поверхностных характеристик бинарных и многокомпонентных расплавов металлических систем является экспериментальное построение изотермы поверхностного натяжения (ПН, $\sigma(x)$) и расчет на основе термодинамики Гиббса других характеристик поверхности расплава с использованием построенной экспериментальной изотермы ПН. Экспериментальные изотермы ПН бинарных систем, далеких по своим свойствам от идеальных растворов, например, бинарные системы с химическими соединениями типа A_nB_m ($n, m \geq 1$), описываются известными в литературе уравнениями изотермы ПН недостаточно точно [1]. Следовательно, нет ясности в понимании роли, квазимолекулярных образований (КМО), образующихся в системах с химическими соединениями типа A_nB_m , группировок разнородных частиц A_iB_j ($i, j \geq 1$), кластеров A_i и B_j ($i, j \geq 2$) и других КМО при формировании поверхностных свойств расплава. С другой стороны, возможность управления поведением основных компонентов A , B и КМО в расплавах бинарных систем $A-B$, определение влияния их на поверхностные свойства расплава может стать одним из способов контролируемой модификации поверхностей расплавов. В связи со сказанным считаем, что разрабатываемая в настоящей работе тема исследования является достаточно актуальной и перспективной.

Степень разработанности темы исследования. В настоящее время построено около 160 экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных металлических систем [1]. С целью улучшения методики обработки экспериментальных изотерм ПН предложено десятки теоретических, полуэмпирических и эмпирических уравнений изотерм ПН [1]. Сделаны попытки аналитического описания сложных изотерм ПН бинарных систем с особенностями на кривых изотермах ПН (с переломами, точками перегиба, экстремумами и т.д.) [1]. Изучение литературы по аналитическому описанию изотерм ПН бинарных систем показывает, что имеющиеся в литературе уравнения изотермы ПН описывают экспериментальные изотермы ПН, если рассматриваемые системы идеальны или близки по своим свойствам к идеальным (или регулярным) растворам. В литературе теоретически описаны поведения КМО в расплавах, однако полученные результаты совпадают с экспериментом лишь качественно. В связи с этим разрабатываемая тема диссертации представляется достаточно актуальной.

Цель и задачи исследования. Показать справедливость уравнения изотермы поверхностного натяжения [2] для монотонных изотерм ПН бинарных систем $A-B$ и изучить возможность использования данного уравнения для аналитического описания более сложных экспериментальных изотерм ПН, например, изотерм бинарных систем, компоненты которых образуют устойчивые химические соединения типа A_nB_m и выяснить роль последних в формировании поверхностных свойств расплавов.

Для реализации поставленной цели были сформулированы и решены следующие задачи:

1. Проанализировать существующие в литературе экспериментальные изотермы ПН бинарных металлических систем $A-B$ (A и B – компоненты системы) и установить общие закономерности и причины изменений ПН в зависимости от состава x (x – молярные доли компонента B бинарной системы $A-B$) раствора.
2. Показать справедливость уравнения изотермы поверхностного натяжения (УИПН), предложенного в [2] для бинарных систем $A-B$, в которых ПН меняется монотонно в зависимости от состава
3. Усовершенствовать методику определения параметров β и F УИПН.
4. На основе УИПН предложить методику для описания экспериментальных изотерм ПН бинарных систем с устойчивыми химическими соединениями типа A_nB_m .

5. На конкретных примерах, посредством расчетов изотерм ПН и адсорбций компонентов, показать возможность использования разработанной методики описания поверхностных свойств сплавов бинарных систем для выяснения роли молекулярных образований типа A_nB_m в формировании поверхностных свойств расплавов.

Научная новизна. В ходе выполнения представленной диссертационной работы впервые показано, что:

1. Основные положения по классификации экспериментальных изотерм ПН Трифонова Н.А., Попеля С.И., Еременко В.Н. и Ватолина Н.А. остаются в силе.

2. Все известные экспериментальные изотермы поверхностного натяжения бинарных систем можно разделить на две группы:

2.1. Изотермы поверхностного натяжения с монотонным изменением ПН;

2.2. Изотермы поверхностного натяжения с особенностями: с изломами, точками перегиба, экстремумами и т.д.

3. Предложенное в [2] нелинейное УИПН впервые представлено в линейном виде.

4. Доказано справедливость УИПН для всех видов монотонных изотерм ПН бинарных систем $A-B$.

5. Показано, что УИПН описывает изотермы ПН бинарных систем идеальных, регулярных и реальных растворов с высокой точностью.

6. Предложена новая, более точная методика определения параметров β и F УИПН.

7. Из УИПН, как частные случаи, можно получить при различных приближениях уравнение Фолькмана для идеальных растворов и уравнение Прилежаева-Дефай для регулярных растворов.

8. Показано, что с использованием УИПН можно описать экспериментальные изотермы ПН бинарных систем $A-B$, компоненты которых A и B образуют устойчивые химические соединения типа A_nB_m и группировки частиц A_iB или AB_j , с высокой точностью (относительные допускаемые ошибки – 1-2 %).

9. На базе экспериментальных данных ПН, показана роль устойчивых молекул типа A_nB_m , либо группировок частиц A_iB_j , в формировании поверхностных свойств расплавов бинарных систем $A-B$, в которых образуются химические соединения типа A_nB_m или группировки частиц A_iB_j .

Теоретическая и практическая значимость работы. Полученные в работе результаты используются при проведении практических занятий и выполнении выпускных квалификационных работ, магистерских и кандидатских диссертаций студентами и аспирантами в Кабардино-Балкарском государственном университете имени Х.М. Бербекова. Основные научные результаты и методические разработки по материалам диссертации внедрены в научно-исследовательскую практику. Разработанные методики расчетов поверхностных характеристик расплавов, новая методика определения параметров β и F УИПН, методики расчетов изотерм адсорбций и поверхностных составов растворов могут быть использованы в научно-исследовательских лабораториях. Полученные новые положения и аналитические выражения, а также результаты могут быть включены в учебный процесс и в производство для разработки новых, современных технологий создания материалов с необходимыми поверхностными свойствами.

Методология и методы исследования. Анализ литературных данных по теме научного исследования, выявление общих закономерностей изменения ПН в рассматриваемых изотермах ПН, разработка методик описания параметров поверхности, получение соответствующих выражений, их анализ и обоснование. Проведение расчетов поверхностных характеристик и их сравнение с результатами известных экспериментов, кроме того анализ полученных результатов и их обобщение.

Основные положения, выносимые на защиту диссертационной работы:

1. Представление нелинейного уравнения изотермы поверхностного натяжения, предложенного в [2], в линеаризованном виде позволяет доказать его справедливость для всех видов изотерм ПН систем с монотонным изменением ПН (см. п. 2.1 научной новизны) и дает новую, более точную методику определения параметров β и F , чем известные методики.
2. УИПН, предложенное в [2], описывает все виды экспериментальных изотерм ПН с монотонным изменением ПН (см. п. 2.1. научной новизны) с высокой точностью (с относительной ошибкой не более 1-2 %), независимо от степени идеальности системы.
3. Из УИПН при различных приближениях можно получить уравнение Фолькмана для идеальных растворов и уравнение Прилежаева-Дефай для регулярных растворов.
4. Представление устойчивых химических соединений – молекул типа A_nB_m , либо группировок частиц A_iB или AB_j в качестве самостоятельных структурных единиц раствора, как и основные компоненты A и B , позволяет разбить основную бинарную систему $A-B$ на вторичные $A-A_nB_m$ и A_nB_m-B и применить к вторичным системам, предложенное в [2] УИПН.
5. Существуют четыре типа простейших изотерм ПН, которые описываются УИПН. Более сложные изотермы (см. п. 2.1 научной новизны) можно представить в виде комбинаций этих простых изотерм ПН.
6. Вторичные системы рассматриваемой бинарной системы по своим свойствам более близки к идеальным растворам по сравнению с исходной системой $A-B$.
7. Молекулы устойчивых химических соединений A_nB_m , (либо группировок частиц A_iB_j) могут вести себя как поверхностно-активные (ПА) или поверхностно инактивные (ПИА) добавки. Под их действиями могут измениться свойства поверхности расплава значительно, что может дать один из способов модификации поверхностей расплавов.

Степень достоверности. Достоверность и надежность полученных результатов подтверждаются согласованностью их с данными расчетов других авторов и результатами экспериментов, согласованностью предлагаемых теоретических выкладок с существующими теоретическими положениями. Применены апробированные физические и математические методы исследования, обработки, анализа и обобщения данных.

Апробация полученных результатов. Основные результаты, новые положения и идеи, выносимые на защиту диссертации, были представлены на:

- Международном междисциплинарном симпозиуме «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). "Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions" (PSP & PT). г. Нальчик – г. Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 2014;
- Международном междисциплинарном симпозиуме «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). "Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions" (PSP & PT). г. Нальчик – г. Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 2015;
- 18-м Международном симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах», ОМА-18. г. Ростов-на-Дону – пос. Южный, 2015;
- Всероссийском научно-практическом конференций «Актуальные проблемы современного материаловедения». г. Грозный, КНИИ РАН 2015 год;
- Международном междисциплинарном симпозиуме «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). "Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions" (PSP & PT). г. Нальчик – г. Ростов-на-Дону – г. Грозный – пос. Южный, 2016;
- Международном междисциплинарном симпозиуме «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). "Physics of surface phenomena,

interfaces boundaries and phase transitions" (PSP & PT). г. Нальчик – г. Ростов-на-Дону – п. Южный, 2017;

– Международном междисциплинарном симпозиуме «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). "Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions" (PSP & PT). г. Нальчик – г. Ростов-на-Дону – п. Шепси, 2018;

– XV Российском научном конференций (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-15) и научная школа молодых ученых. ОИВТ АН, МЭИ. г. Москва. 2018;

– Международном междисциплинарном симпозиуме «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). "Physics of surface phenomena, interfaces boundaries and phase transitions" (PSP & PT). г. Нальчик – п. Приэльбрусье, 2019, где нашли поддержку и одобрение.

Личный вклад автора. Постановка темы диссертации, цель и задачи и вытекающие из нее сформулированы научным руководителем Х.Х. Калажоковым. Выносимые на защиту результаты диссертационной работы получены и разработаны автором лично или при ее непосредственном участии. Автором разработан алгоритм расчетов термодинамических характеристик поверхностей бинарных систем, составлены программы для автоматизированной обработки результатов экспериментальных данных на персональном компьютере, а также проведен анализ результатов, и их сопоставление с литературными и экспериментальными данными. Принимала активное участие в обсуждении и интерпретации результатов и выводов.

Публикации по теме диссертации. По теме диссертации опубликовано 29 печатных работ, в том числе 7 работ в журналах, рекомендованных ВАК РФ и две статьи, индексируемых международными системами цитирования Scopus и Web of Science.

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа изложена на 166 страницах. Структура кандидатской диссертации: введение, четыре главы, заключение, список литературы и приложения. Она включает в себя 108 рисунков и 16 таблиц, часть из которых вынесена в приложение.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** обосновывается актуальность разрабатываемой темы, сформулированы цель и задачи, приведены защищаемые положения, указаны новизна и достоверность полученных результатов, их практическая ценность, личный вклад автора, приведены сведения об апробации результатов работы и публикациях.

В **первой главе** приводится обзор экспериментальных изотерм ПН ($\sigma(x)$) бинарных металлических систем $A-B$, где A и B – компоненты системы. Здесь же представлен также обзор теоретических уравнений изотерм ПН. Рассмотрены попытки описания экспериментальных изотерм ПН имеющимися в литературе уравнениями изотерм ПН. Рассмотрены попытки Н.А Трифонова, С.И. Попеля, В.Н. Еременко, П.И. Василиу, Н.А. Ватолина систематизировать существующие экспериментальные изотермы ПН.

Анализ основных причин изменений ПН в зависимости от состава раствора показывает:

- что при слабых Ван-дер-Ваальсовых или средних физических взаимодействиях компонентов в растворе изотермы ПН гладкие, без особенностей и представляет собой монотонно спадающую кривую в зависимости от состава, например, от большего значения ПН (растворителя) к меньшему значению ПН (растворяемого компонента) или наоборот. При этом значения $(\partial\sigma/\partial x)_{P,T}$ везде определены. Таких изотерм ПН больше половины из, примерно, 160 изученных бинарных систем и имеют простейший монотонный вид (см. рис.1, $a-z$).

- существует четыре вида простейших изотерм ПН (рис. 1, $a-z$). Из них известными в литературе термодинамическими уравнениями изотермы ПН можно описать удовлетворительно изотермы типа a и b рис. 1.

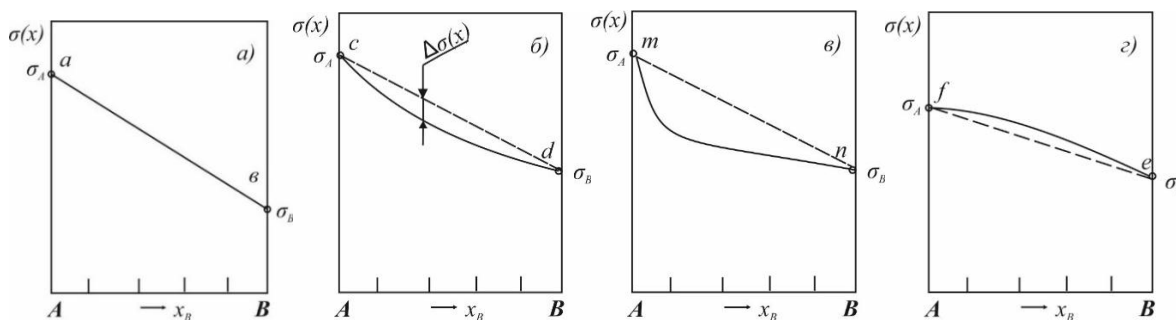


Рис. 1. Простейшие виды изотерм ПН бинарных систем: (a) – аддитивная прямая; ($b-z$) – реальные изотермы ПН; $\Delta\sigma(x)$ – отклонение реальной изотермы ПН от аддитивной

- сильное химическое взаимодействие компонентов A и B бинарной системы $A-B$ приводит к особенностям (изломы, точки перегиба, разрыв производной $(\partial\sigma/\partial x)_{P,T}$, экстремумы (максимум, минимум)) на изотермах ПН. Причина – образование химических соединений типа A_nB_m , атомных группировок A_iB_j , кластеров A_i или B_j и других КМО, устойчивых (не распадающихся) при температуре измерения ПН и играющих роль самостоятельных ПА и ПИА структурных единиц расплава.

Далее показано, что системы, типа a и b рис. 1 описываются известными термодинамическими УИПН вполне удовлетворительно. Попытки описать теоретически

изотермы, особенно типа *в* и *г* (при $\Delta\sigma(x)$ значительных), не увенчались успехом. Изотермы ПН рис. 1, *а-в* описываются уравнением изотермы ПН,

$$\sigma(x) = \beta \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x} + \sigma_A(1-x) + \sigma_B \cdot x, \quad (1)$$

предложенным в [1] с высокой точностью (допускаемая ошибка около 1%). Здесь β [мН/м] и F – параметры уравнения изотермы (1), не зависящие от состава расплава, σ_A и σ_B [мН/м] – значения ПН чистых компонентов – растворителя A и добавляемого компонента B , x – молярные доли компонента B системы $A-B$.

Во второй главе приводятся основные результаты и положения, которые получены из анализа литературных данных по изучению изотерм ПН и лежащие в основе аналитического описания экспериментальных изотерм ПН бинарных систем, компоненты которых образуют устойчивые химические соединения типа A_nB_m . К ним относятся:

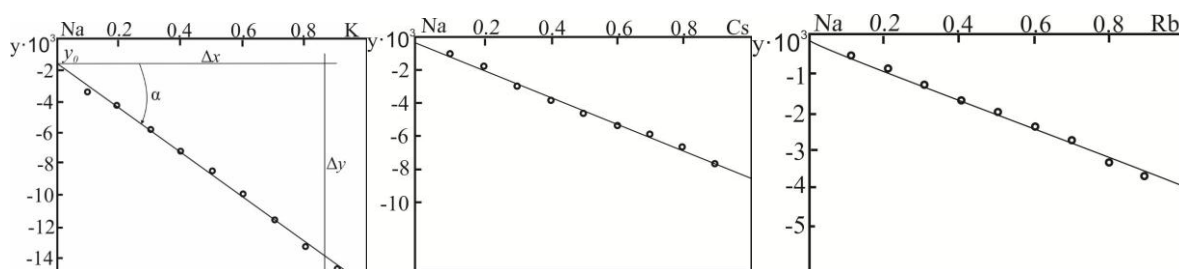
- уравнение (1) описывает экспериментальные изотермы ПН бинарных и тройных систем с монотонным изменением ПН (рис.1) с высокой точностью во всей области составов, независимо от степени идеальности системы. Допускаемая ошибка около 1%.
- нелинейное уравнение (1) можно преобразовать к линейному виду, который позволяет доказать справедливость (1) для всех видов монотонных изотерм ПН (рис.1, *а-г*) и дает еще один, более точный, чем существующий, способ определения параметров β и F .

В работе предложена методика доказательства справедливости уравнения (1) для систем с монотонным изменением ПН (рис. 1, *а-г*), которая заключается в следующем. Для доказательства справедливости (1) его следует преобразовать к виду

$$y(x) = \frac{(1-x)x}{\Delta\sigma(x)} = \frac{1}{\beta(F-1)} + \frac{1}{\beta} \cdot x, \quad (2)$$

$$\text{где } \Delta\sigma(x) = \sigma_s(x) - \sigma_A(1-x) + \sigma_B \cdot x \quad (3).$$

Очевидно, что величину $\Delta\sigma(x)$ можно вычислить из данных экспериментов (рис. 1, *б*), а, следовательно, можно вычислить и величину функции $y(x)$ (см. второе выражение (2)) для разных x . Если экспериментальные данные по изучению изотерм ПН для данной системы $A-B$ дают прямую линию $y(x)$ (см. правую часть формулы (2)), то уравнение (1) справедливо для этой системы. Так было показано справедливость (1) для всех бинарных систем с монотонным изменением ПН (рис. 1) в зависимости от состава. Оказалось, что таких экспериментальных изотерм ПН металлических систем в литературе более 90. В качестве примера на рис. 2 представлены экспериментальные прямые (2) для систем щелочных металлов, в которых мы имеем все виды монотонных изотерм ПН рис. 1, *а-в*.



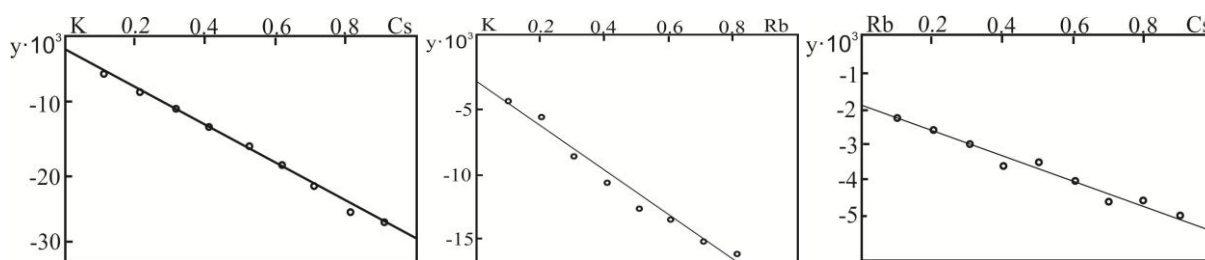


Рис. 2. Прямые (2) для бинарных систем щелочных металлов

Разработана новая методика определения параметров β и F уравнения (1), которая заключается в том, что из графиков типа рис. 2, а, посредством продолжения экспериментальных прямых (2) до пересечения с осью $y(x)$, находят значение y_0 (см. рис. 2, а и формулу (2)). Определив угол наклона прямой (2) к оси концентрации (рис. 2, а), можно найти $\tan \alpha$. Из (2) и рис. 2, а видно, что

$$y_0 = \frac{1}{\beta(F-1)}. \quad (4)$$

$$\tan \alpha = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{1}{\beta}. \quad (5)$$

Совместное решение (4) и (5) относительно β и F позволяет найти их значения. Такая методика обработки экспериментальных изотерм ПН позволяет определить не только значения β и F данной системы, но и показать справедливость уравнения (1), а также сделанных предположений при выводе уравнения (1). Показано, что такая методика определения β и F дает более точные значения параметров β и F (таблица 1). Заметим, что уравнение (1) позволяет описать экспериментальные изотермы с монотонным изменением ПН достаточно точно (допускаемая ошибка $\approx 1\%$), в приближении реального раствора.

В литературе встречаются экспериментальные изотермы ПН с положительным отклонением изотермы ПН от аддитивной прямой, например, системы $Cd-Sn$, $Cu-Pd$, $Pb-Bi$ и др. (рис. 3):

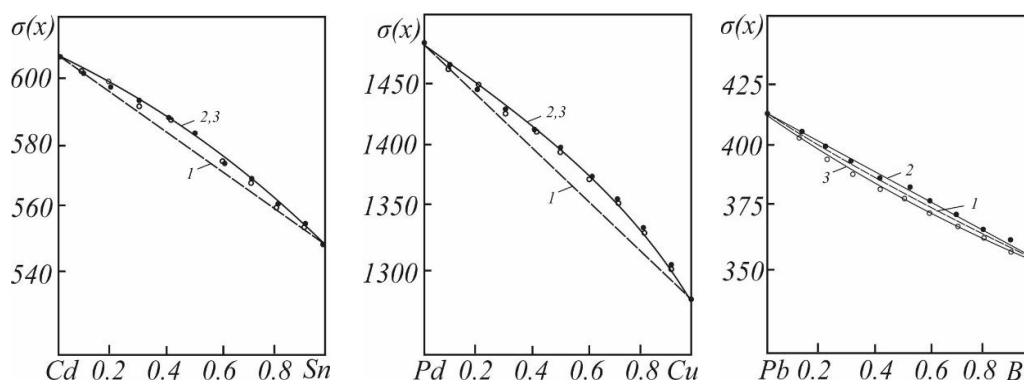


Рис. 3. Изотермы ПН систем $Cd-Sn$ ($T=723$ K), $Cu-Pd$ ($T=1473$ K), $Pb-Bi$ ($T=773$ K)

Нами были построены прямые (2) для систем $Cd-Sn$, $Cu-Pd$, $Pb-Bi$ (см. рис. 4):

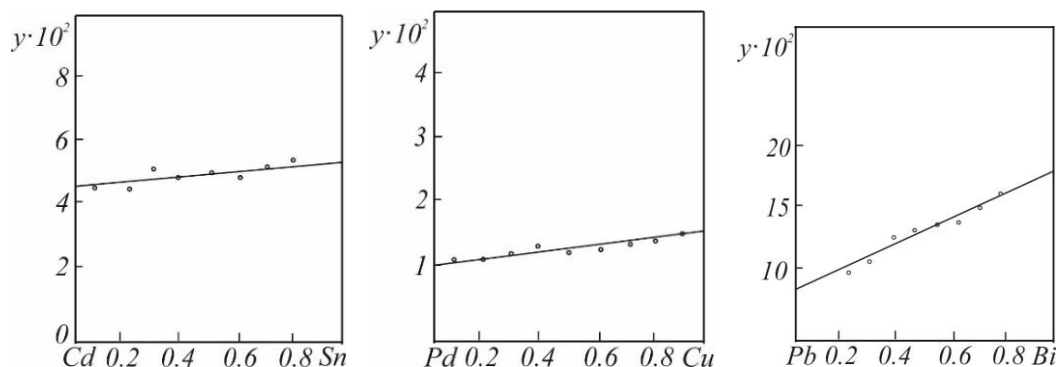


Рис. 4. К определению параметров β и F для бинарных систем
а) Cd-Sn, б) Pd-Cu и в) Pb-Bi

Экспериментальные прямые (рис. 2 и 4) показывают, что изотермы ПН систем щелочных металлов и бинарных систем *Cd-Sn*, *Pd-Cu*, *Pb-Bi* подчиняются уравнению (1) и все допущения, которые были сделаны при выводе уравнения (1), в частности β и $F = \text{const}$, справедливы для этих систем. По методике, изложенной выше нами были определены значения β и F для этих систем (таб. 1 и 2).

Таблица 1. – Значения β и F бинарных систем щелочных металлов при $T = 373\text{K}$

Система	$\sigma_A(x)$, мН/м	$\sigma_B(x)$, мН/м	β , мН/м	F
<i>Na-Cs</i>	205	71,4	– 125,0	27,7
<i>Na-K</i>	205	113,6	– 76,9	9,7
<i>Na-Rb</i>	205	92,7	– 108,0	27,5
<i>K-Rb</i>	113,6	92,7	– 8,5	4,9
<i>K-Cs</i>	113,6	71,4	– 34,7	25,0
<i>Rb-Cs</i>	92,7	71,4	– 32,3	2,6

Таблица 2. – Значения σ_A и σ_B , β и F для систем *Cd-Sn*, *Pd-Cu* и *Pb-Bi*

Система	σ_A	σ_B	ρ_A	ρ_B	β	F
<i>Cd-Sn</i>	610	530	8,69	7,26	76,9	1,8
<i>Pd-Cu</i>	1470	1300	8,96	12,0	65,7	3,53
<i>Pb-Bi</i>	420	360	11,3	9,79	6,4	1,99

Подставляя найденные значения β и F в (1), нами были вычислены значения ПН при соответствующих значениях x . Полученные результаты по ПН для систем *Cd-Sn*, *Pd-Cu*, *Pb-Bi* приведены на рис. 3. Как видно из рис. 3, согласие расчетных ПН (°) с экспериментом (•) вполне удовлетворительное.

Таким образом, мы видим, что уравнение изотермы ПН (1) для бинарных систем с монотонным изменением ПН в зависимости от состава справедливо для всех четырех видов простейших изотерм ПН (рис. 1). При этом значения β и F разные: а) $\beta = 0$ или $F \approx 1$; б) F – мало и $\beta < 0$; в) $\beta < 0$, $F \gg 1$; г) $\beta > 0$ и F равно около 1 или $0 < F < 1$. Итак, главными преимуществами уравнения (1) перед существующими являются: 1 - оно описывает монотонные изотермы ПН, независимо от вида изотермы ПН и степени идеальности

рассматриваемой системы; 2 - параметры β и F уравнения (1) можно найти из данных экспериментов. В связи с этим нами выбрано уравнение (1) для описания более сложных изотерм (п. 2.2).

Далее показано, что сложную изотерму ПН (рис. 5) с особенностями можно представить в виде комбинаций простых изотерм (рис. 1, а-г).

Приведем несколько примеров конкретных изотерм ПН с химическим соединением типа A_nB_m в виде комбинаций простых изотерм (рис. 1):

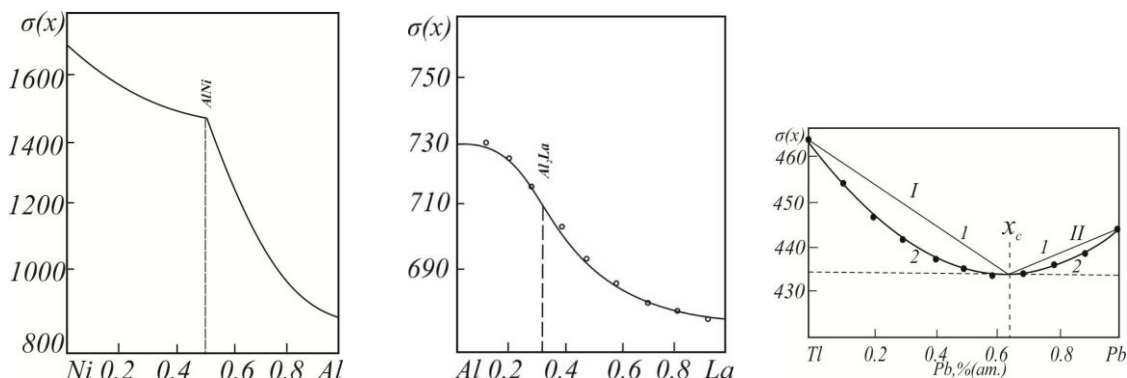


Рис. 5. Сложные виды изотерм ПН бинарных систем:

1. Изотерму $Ni-Al$ рис. 5 можно представить (см. рис. 1, а), в виде комбинации двух простых изотерм $(c-d)-(c-d)$;
2. Изотерма $Al-La$ рис. 5 представляется (см. рис. 1, г и б) в виде комбинации двух простых изотерм $(f-l)-(c-d)$;
3. Изотерма $Tl-Pb$ рис. 5 представляется (см. рис. 1, в и б) в виде комбинации двух простых изотерм $(c-d)-(d-c)$, и т.д.

Итак, для аналитического описания сложной экспериментальной изотермы ПН бинарной системы, основную систему $A-B$ с устойчивыми химическими соединениями A_nB_m , A_kB_l следует разбить на составляющие вторичные системы: $A-A_nB_m$, $A_nB_m-A_kB_l$, A_kB_l-B и описать изотерму ПН каждой вторичной системы уравнением (1). При этом все расчеты проводятся в приведенной системе координат (штриховой OX'), а затем результаты пересчитываются в основную систему координат OX (см. формулы (6) и (10)). В следующих разделах диссертации приведены примеры применения изложенных положений к конкретным системам.

В третьей главе приводятся примеры применения предложенной методики, основанная на предположениях, сделанных выше в настоящей работе, для описания изотерм ПН с химическими соединениями типа A_nB_m . Методика представлена для двух типов бинарных систем, в которых образуются одно и два химических соединения.

1. **Системы с одним химическим соединением.** Пусть имеем систему с одним химическим соединением типа A_nB_m (рис. 6).

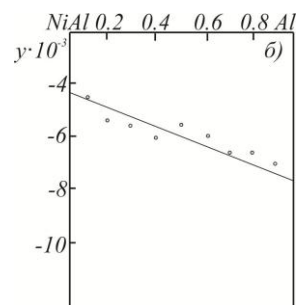
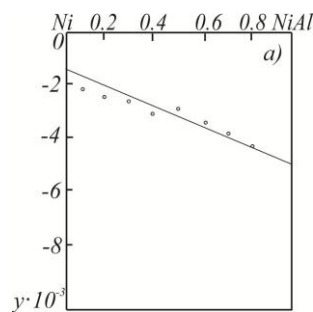
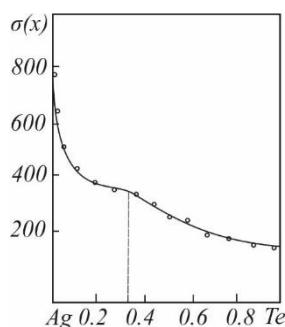
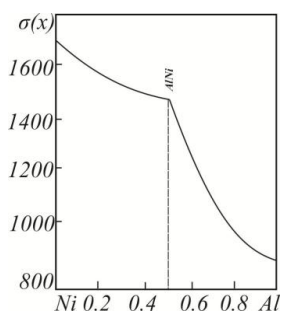


Рис. 6. Изотермы ПН для систем *Ni-Al* и *Ag-Te* Рис. 7. Прямые $y(x)$ для вторичных систем *Ni-Al*

Разобьём систему *Ni-Al* на две вторичные, например, систему *Ni-Al* на *Ni-NiAl* и *NiAl-Al*. Обработав каждую вторичную изотерму системы по методике (см. выше), вычислим значения β_i и F_i для каждой вторичной системы. При этом следует помнить, что все расчеты проводятся в системе координат вторичной системы (в системе координат OX'). А затем результаты пересчитываются в обычную систему координат OX по формулам:

$$\text{для } A-A_nB_m \quad x' = \frac{x}{x_c}; \quad (6)$$

$$\text{для } A_nB_m-B \quad x' = \frac{x - x_c}{1 - x_c}.$$

(7)

По такой методике нами обработаны известные в литературе изотермы ПН бинарных систем *Sb-Se*, *Ag-Te*, *Ni-Al*, *Fe-Ge*, *Pt-B*, *Pb-Hg*. В качестве примера на рис. 7 приведены прямые (2) для вторичных систем *Ni-NiAl* и *NiAl-Al*. Такие же прямые получаются и для всех других систем, что говорит о справедливости уравнения (1) для них. Здесь видно, что данные изотермы можно представить в виде комбинаций двух простых рис. 1 типа $(f-l)-(c-d)$. По такой же методике обрабатывали, изотермы ПН другого вида изотерм систем *Al-La*, *Al-Nd* (рис. 8, точки – эксперимент, сплошная линия – расчет по уравнению (1)):

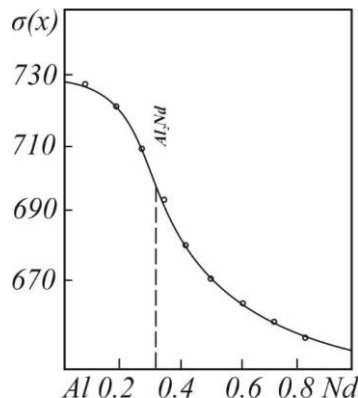
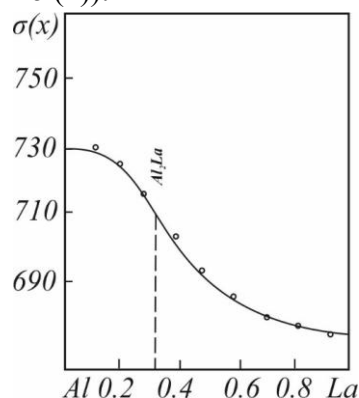


Рис. 8. Изотермы ПН для систем *Al-La*, *Al-Nd*

Как видно из рис. 8 согласие расчетных ПН (сплошные линии) с экспериментом (точки) вполне удовлетворительное.

2. Системы с двумя химическими соединениями.

При наличии в системе *A-B* двух химических соединений типа A_nB_m и A_kB_l поступали также как и в случае с одним химическим соединением. Для перевода результатов расчетов из приведенной системы координат OX' в OX были использованы формулы:

$$\text{для } A-A_nB_m \quad x' = \frac{x}{x_c}; \quad (8) \quad \text{для } A_nB_m-A_kB_l \quad x' = \frac{x-x_c}{x_k-x_c}; \quad (9) \quad \text{для } A_kB_l-B \quad x' = \frac{x-x_k}{1-x_k}, \quad (10)$$

где x_c и x_k – концентрации, соответствующие химическим соединениям A_nB_m и A_kB_l .

По предлагаемой методике нами описаны изотермы двух систем $In-Bi$ и $Mn-Si$, имеющих по два химических соединения: In_2Bi , $InBi$ и Mn_5Si_3 , $MnSi$. Изотерма системы $In-Bi$ является сложной (рис. 9). Она является комбинацией простых вторичных систем: $(c-d)-(f-l)-(c-d)$ (рис. 1). Входные данные для расчетов изотерм систем ПН $In-Bi$ и $Mn-Si$ представлены в таблице 4. Здесь же приводятся найденные нами значения β и F . На рис. 8 и 9 представлены экспериментальные ($^\circ$) и расчетные (сплошные линии) изотермы ПН. Последние получены после перевода результатов расчетов из приведенной системы OX' в систему отсчета OX . Система $Mn-Si$ оказалась еще более интересной. Ее экспериментальная изотерма ПН представлена на рис. 10 (точки).

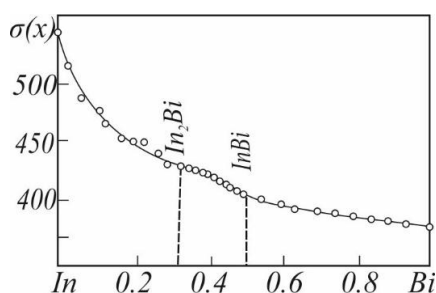


Рис. 9. Изотерма ПН системы $In-Bi$ при $T=573$ К с двумя химическими соединениями: сплошная линия – расчет по (1); $^\circ$ – эксперимент

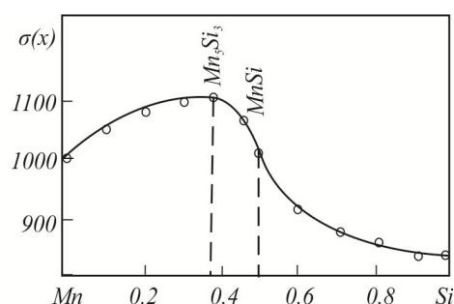


Рис. 10. Изотерма ПН системы $Mn-Si$ при $T=1823$ К с двумя химическими соединениями: сплошная линия – расчет по (1); $^\circ$ – эксперимент

Как видно, она также состоит из трех вторичных систем: 1 – $Mn-Mn_5Si_3$, 2 – Mn_5Si_3-MnSi , 3 – $MnSi-Si$. Видно, что изотерма ПН системы $Mn-Si$ также является комбинацией трех простых: $(l-f)=(f-l)=(c-d)$ (рис. 1). Обработка данных этих вторичных систем по методике (см. выше) дает прямые (4), представленные на рис. 11.

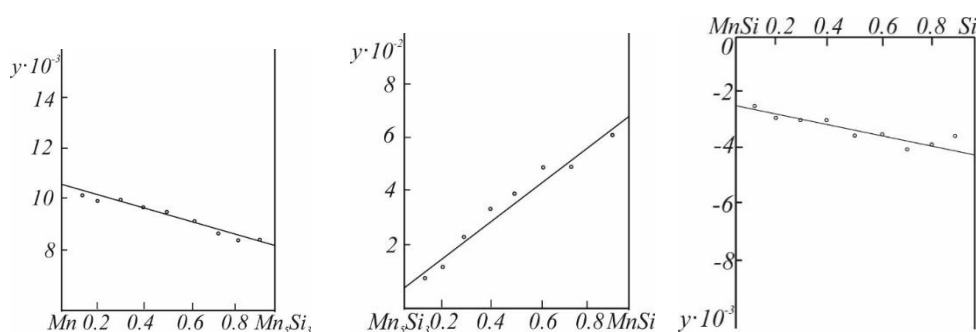


Рис. 11. Графики прямой (2) для вторичных систем $Mn-Si$

Из рис. 11 видно, что для вторичных систем $Mn-Si$ уравнение (1) является справедливым. Тогда, сделав расчет β и F вторичных систем $Mn-Si$, получим данные, приведённые в таблице 3.

Таблица 3. – Значения β и F для систем $In-Bi$ и $Mn-Si$

система	вторичная система	σ_A	$\sigma_{A_n B_m}$	$\sigma_{A_k B_L}$	σ_B	ρ_A	ρ_B	β	F
<i>In-Bi</i>	<i>In-In₂Bi</i>	550	428	—	—	7,31	8,12	-123	3,0
	<i>In₂Bi-InBi</i>	—	428	405	—	8,12	8,55	20,8	2,5
	<i>InBi-Bi</i>	—	—	405	371	8,55	9,79	-16,6	3,5
<i>Mn-Si</i>	<i>Mn-Mn₅Si₃</i>	1020	1130	—	—	7,30	5,41	-333,3	0,52
	<i>Mn₅Si₃-MnSi</i>	—	1130	1010	—	5,41	4,81	18,5	5,15
	<i>MnSi-Si</i>	—	—	1010	740	4,81	2,33	-556	1,75

Здесь же приведены ПН и плотности граничных компонентов вторичных систем *Mn*, *Mn₅Si₃*, *MnSi*, и *Si*. Результаты расчетов изотерм ПН систем *In-Bi* и *Mn-Si* представлены на рис. 9 и 10 (сплошная линия). Как видно, и в этом случае согласие расчетных изотерм ПН с экспериментальными изотермами вполне удовлетворительное.

Среди экспериментальных изотерм ПН бинарных металлических систем встречаются изотермы ПН с широким минимумом [2]. К ним можно отнести изотермы ПН бинарных систем *Tl-Pb* и *In-Sn* (рис. 12). Для описания экспериментальных изотерм ПН, последние *Tl-Pb* и *In-Sn*, были разбиты на составляющие вторичные: *Tl-TlPb₂*, *TlPb₂-Pb* и *In-InSn₂*, *InSn₂-Sn*. Применяя разработанную методику определения параметров β и F к этим вторичным системам, были найдены значения параметров β и F (табл. 4).

Таблица 4. – Значения β и F для вторичных систем бинарных систем *Tl-Pb* при $T=673$ К и *In-Sn* при $T=773$ К

Система	β	F
<i>Tl-TlPb_j</i>	-41,0	2,32
<i>Tl_iPb_j-Pb</i>	26,7	0,58
<i>In-In_iSn_j</i>	—	1,0
<i>In_iSn_j-Sn</i>	-500,0	0,98

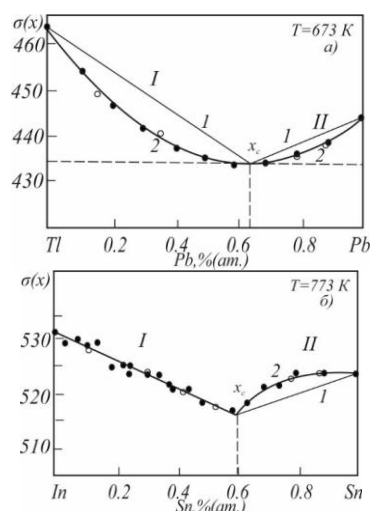


Рис. 12. К расчету изотерм ПН бинарных систем с минимумом: (•) – эксперимент; (°) – расчет

Подставляя значения β и F в (10), были рассчитаны ПН бинарных систем *Tl-TlPb₂*, *TlPb₂-Pb* и *In-In₂Sn₃*, *In₂Sn₃-Sn* (рис.12, а и б белые точки). Как видно из рис. 12 согласие расчетных ПН с экспериментальными удовлетворительное. Таким образом, разработанная методика позволяет с достаточной точностью описать сложные экспериментальные изотермы ПН.

Четвертая глава посвящена расчетам адсорбции и состава поверхности расплавов бинарных систем, выявлению роли молекул устойчивых химических соединений типа A_nB_m в формировании поверхностных свойств расплавов.

Адсорбции компонентов вычисляли двумя способами:

1. В приближении идеальных растворов по известной формуле:

$$\Gamma_B^{(N)}(x) = -\frac{(1-x)x}{RT} \left(\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x} \right)_{P,T}. \quad (10)$$

При этом величину $(\partial \sigma / \partial x)_{P,T}$ вычисляли с использованием (1). Продифференцировав (1) и, подставляя полученное в (11), было получена формула [1]

$$\Gamma_B^{(N)}(x) = -\frac{(1-x)x}{RT} \left(\beta(F-1) \frac{1-2x-(F-1)x^2}{[1+(F-1)x]^2} - (\sigma_A - \sigma_B) \right) \quad (11)$$

для расчетов адсорбции второго компонента бинарной системы $A-B$.

2. В приближении реальных растворов адсорбцию вычисляли с использованием « N – варианта» адсорбции по Гуггенгейму-Адама по формулам

$$\Gamma_B^{(N)}(x) = \frac{x^\omega - x}{\omega_m(x)}, \quad (12) \quad (x^\omega - x) = \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x}. \quad (13)$$

Здесь $(x^\omega - x)$ – избыточная адсорбция в молярных долях, $\omega_m(x)$ – молярный объем раствора состава x . Преимуществами такой методики расчета адсорбции являются то, что, во-первых, формула (11) избавляет нас от трудоемкой и недостаточно точной процедуры графического дифференцирования изотермы ПН– функции $\sigma(x)$. Во-вторых, формулы (12) и (13) позволяют нам вычислить адсорбцию по точным формулам В.К. Семенченко. Такая возможность появилась с введением формулы (1) и разработкой методики определения параметра F по формуле (2). На рис. 13 представлены результаты расчетов адсорбции B_i в бинарной системе $Pb-Bi$.

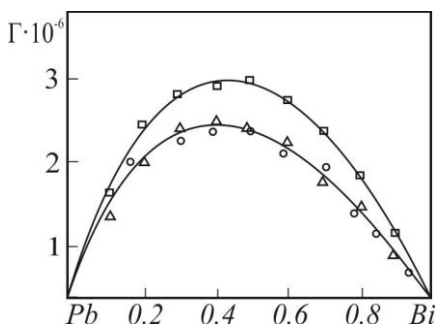


Рис. 13. Результаты расчетов адсорбции висмута в расплавах системы $Pb-Bi$ при $T=673$ К: $\square$ – в приближении идеального раствора по (10); $^\circ$ – с учетом термодинамической активности; Δ – по формуле (12) и (13)

Как видно из рис. 13, результаты расчетов адсорбции по (12) и (13) в пределах ошибки экспериментов совпадают с результатами, полученными с учетом термодинамической активности компонентов в системе ($^\circ$). Поэтому мы отдаем предпочтение данным, полученным по формуле (12) и (13).

В качестве примера на рис. 14 представлены результаты расчетов адсорбции второго компонента в бинарных растворах щелочных металлов по методикам 1 и 2:

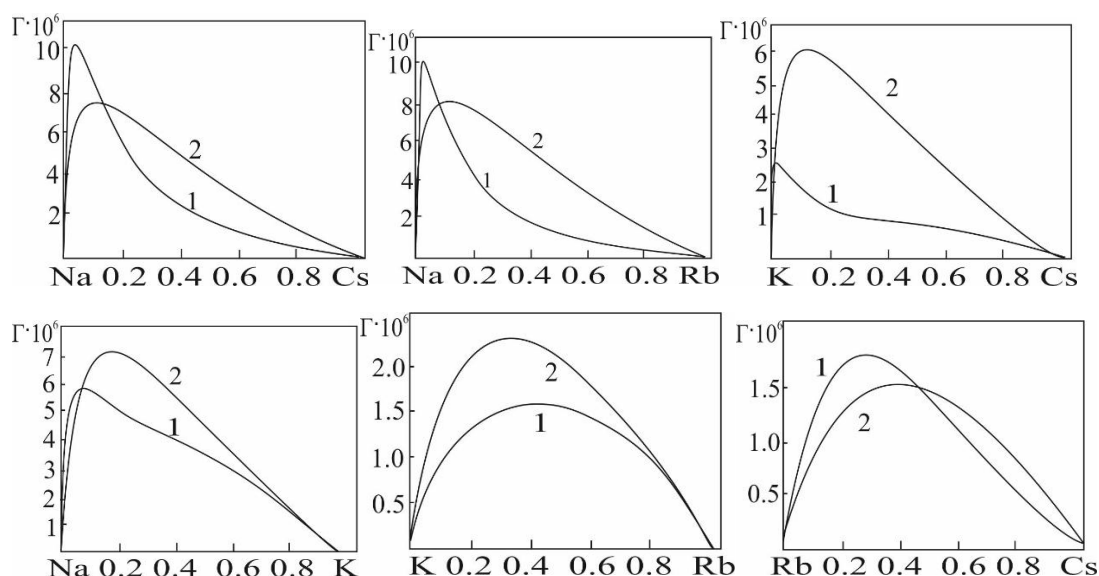


Рис. 14. Результаты расчетов адсорбции вторых компонентов в системах $Na-Cs$, $Na-Rb$, $Na-K$, $K-Cs$, $K-Rb$, $Rb-Cs$ щелочных металлов: 1 – по (12); 2 – по (13) – (14)

Из полученных данных рис. 14 видно, что чем ближе компоненты по своим физическим свойствам друг к другу, тем кривые адсорбции, вычисленные по формулам (11) и (13), ближе друг к другу. Более интересными являются результаты расчетов адсорбции компонентов по (13) бинарных систем, в которых образуются устойчивые химические соединения A_nB_m . Таких систем изучено 10: $Sb-Se$, $Ag-Te$, $Ni-Al$, $Fe-Ge$, $Pt-B$, $Pb-Hg$, $Al-La$, $Al-Nd$, $In-Bi$, $Mn-Si$. Для всех вторичных систем с одним или двумя химическими соединениями обработка данных экспериментов по изотермам ПН по нашей методике дает прямые линии. Что подтверждает справедливость (1) для этих систем. В качестве примера приведем результаты, полученные для систем: $Ni-Al$, $In-Bi$, $Mn-Si$.

1. Система с одним химическим соединением $Al-Ni$, $Al-La$ и др. В качестве примера на рис. 15 и 16 представлены результаты обработки данных систем $Al-Ni$ по предлагаемой методике.

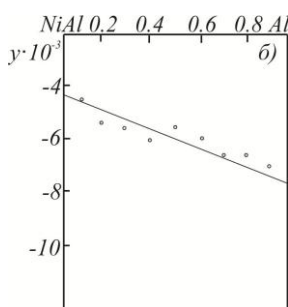
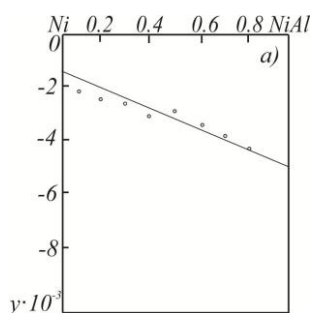


Рис. 15. Прямые (2) для вторичных систем $Ni-Al$: а) – $Ni-AlNi$; б) – $NiAl-Al$

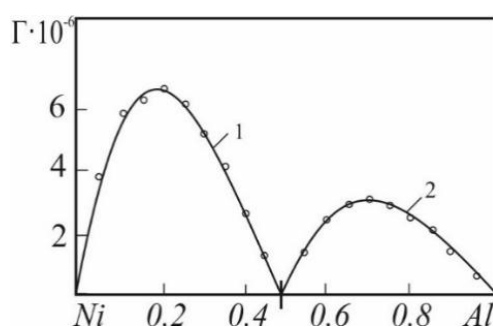


Рис.16. Адсорбция $NiAl$ (кривая 1) и Al (кривая 2) в системе $Ni-Al$

2. Системы с двумя химическими соединениями $In-Bi$ и $Mn-Si$. Результаты обработки данных $In-Bi$ и $Mn-Si$ представлены на рис. 17.

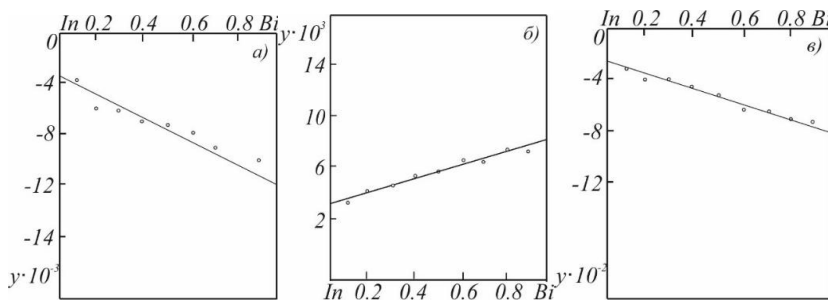


Рис. 17. Прямые (2) для вторичных систем $In-Bi$:
а) – $In-In_2Bi$; б) – $In_2Bi-InBi$; в) – $InBi-Bi$

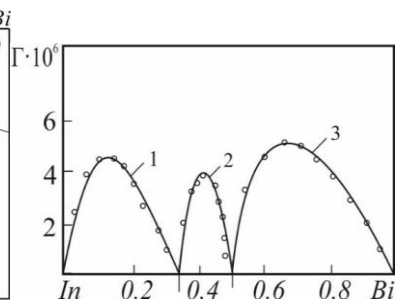


Рис. 18. Адсорбция In_2Bi (кривая 1), $InBi$ (кривая 2) и Bi (кривая 3), системе $In-Bi$

Из рис. 18 видно, что молекулы In_2Bi , $InBi$, и атомы Bi поверхностно-активны в бинарных вторичных системах, $In-In_2Bi$, $In_2Bi-InBi$, $InBi-Bi$ соответственно.

Прямые (2) для вторичных систем представлены на рис. 19.

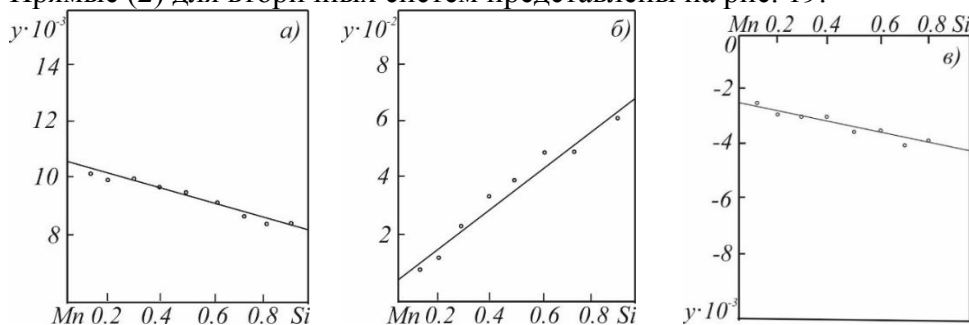


Рис. 19. Прямые (2) для вторичных систем:
а) – $Mn-Mn_5Si_3$; б) – Mn_5Si_3-MnSi ; в) – $MnSi-Si$

Результаты расчетов адсорбции компонентов по (13) представлены на рис. 20.

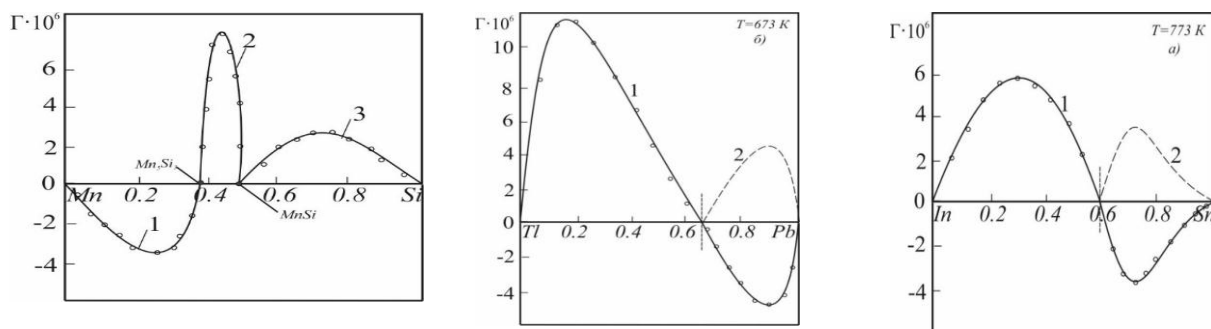


Рис. 20, а. Адсорбция $Mn_5Si_3, MnSi$ и Si в системе $Mn-Si$:

1 – Mn_5Si_3 в системе $Mn-Mn_5Si_3$; 2 – $MnSi$ в системе Mn_5Si_3-MnSi ; 3 – Si в системе $MnSi-Si$

Рис. 21, б и в. Адсорбция группировок частиц A_iB_j на поверхности расплавов:

б) – система $Tl-Pb$ при $T = 673K$; в) – система $In-Sn$ при $T = 773K$

В отличие от системы $In-Bi$ в системе $Mn-Si$ молекулы Mn_5Si_3 инактивны во вторичной системе $Mn-Mn_5Si_3$. Поверхностную активность проявляют $MnSi$ и Si во вторичных системах Mn_5Si_3-MnSi и $MnSi-Si$.

Далее представляет интерес расчет адсорбции компонентов в бинарных системах $In-Sn$ и $Tl-Pb$. Для этого нами использованы значения F , найденные выше (см. табл.4). Адсорбцию во вторичных системах считали по формуле (13). Результаты представлены на рис. 21, б) и в). Левая часть кривой изотермы адсорбции 1 показывает адсорбцию

группировок атомов Tl_1Pb_2 и In_2Sn_3 на поверхности расплавов, а правая часть кривой – адсорбцию свинца или олова. В последнем случае (см. кривые 2) на поверхности расплавов адсорбируются опять ассоциаты атомов Tl_1Pb_2 и In_2Sn_3 .

Итак, как видно из рис. 21, образующиеся в системах $In-Sn$ и $Tl-Pb$ ассоциаты атомов типа A_iB_j адсорбируются на поверхностях расплавов положительно, что и приводит к дополнительному уменьшению ПН расплавов – образованию минимума на изотерме ПН. Основное уменьшение ПН расплавов систем связаны с адсорбцией свинца или олова на поверхности расплава.

По найденным значениям точек x_c нами установлены составы образующихся группировок атомов: для системы $Tl-Pb$ ассоциат A_iB_i состоит из одного атома талия и двух атомов свинца Tl_1Pb_2 , а для системы $In-Sn$ ассоциат состоит из двух атомов индия и трех атомов олова In_2Sn_3 .

Далее нами были проведены расчеты поверхностных концентраций компонентов в изученных нами системах:

а) в приближениях идеальных растворов по известной формуле

$$x_2^{\omega} = \frac{x_B + \frac{\omega_A}{n} \cdot \Gamma_B^{(N)}}{1 + \frac{\omega_A - \omega_B}{n} \cdot \Gamma_B^{(N)}}, \quad (15)$$

б) в приближении реальных растворов по формуле В.К. Семенченко

$$x^{\omega} = \frac{F \cdot x}{1 + (F - 1)x}. \quad (16)$$

Использование формулы (16) для расчетов $x_i^{\omega}(x)$ стало возможным благодаря методике определения параметра F на основе уравнения (2). Ниже представлены полученные нами результаты составов поверхностных растворов (рис. 22):

1. Для систем щелочных металлов:

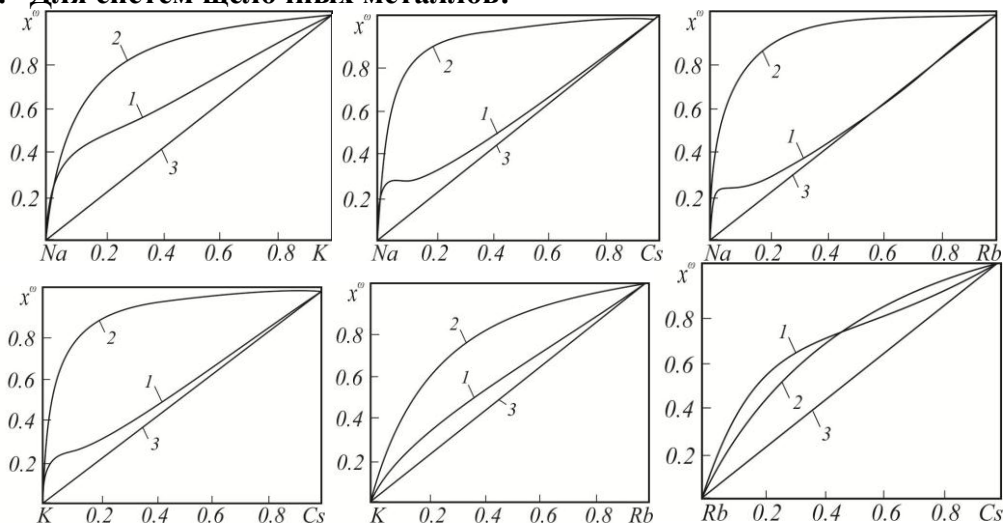


Рис. 22. Составы поверхностных растворов (x_i^{ω}) бинарных систем щелочных металлов (i – второй компонент системы): 1 – по (15); 2 – по (16) и 3 – x – содержание второго компонента в объеме

2. Для систем $Ag-Te$, $Pb-Hg$, $Al-La$ с одним химическим соединением

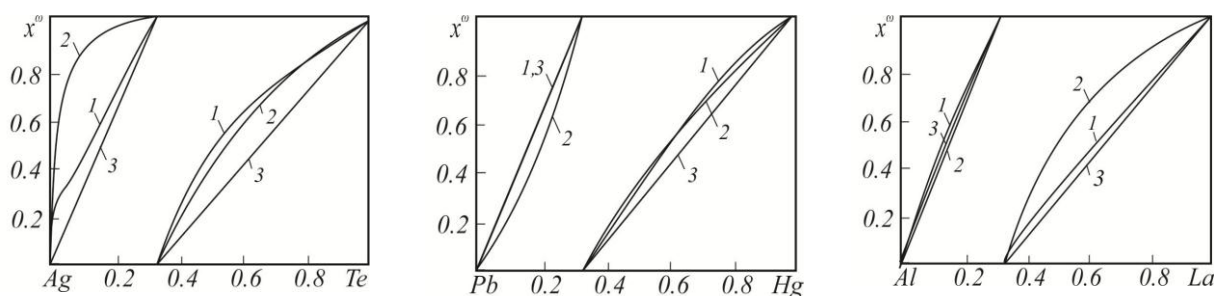


Рис. 23. Результаты расчетов $x_i^{\omega}(x)$ химсоединений: Ag_2Te , $HgPb_2$ и $AlLa$ и вторых компонентов вторичных систем: $Ag-Te$, $Hg-Pb$ и $Al-La$: 1 – по (15); 2 – по (16) и 3 – объемная концентрация второго компонента $x^{\omega} = x$

Анализ результатов показывает, что чем система (вторичная) ближе к идеальной, тем кривые 1 и 2 ближе друг к другу и они обе ближе к кривой 3. Для неидеальных систем кривая 2 значительно отличается от 1 и 3.

3. Для систем $In-Bi$, $Mn-Si$ с двумя химическими соединениями результаты поверхностных концентраций представлены ниже, на рис. 24:

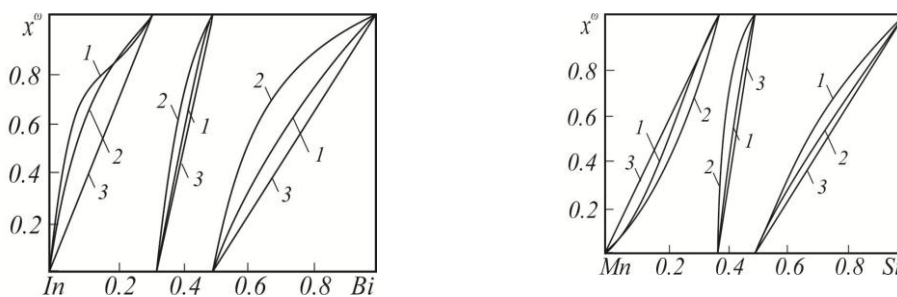


Рис. 24. Изотермы поверхностных концентраций компонентов бинарной системы $In-Bi$ и $Mn-Si$: 1 – по (15); 2 – по (16); 3 – объемное содержание второго компонента вторичной системы

Как видно, влияние молекул A_nB_m и КМО A_iB_j на изотерме ПН, адсорбций и составов поверхности расплава значительное.

Заключение

- Известные в литературе экспериментальные изотермы поверхностного натяжения бинарных систем $A-B$ можно разделить на две большие группы:
 - 1.1 – изотермы ПН с монотонным изменением ПН. Таких изотерм из изученных экспериментальных изотерм ПН составляют более половины;
 - 1.2 – изотермы ПН с изломами, с точками перегиба, с экстремумами и т.д.
 В первом случае (п.1.1) взаимодействие компонентов A и B системы не очень сильное, а во втором случае (п.1.2), как правило, наблюдается сильное взаимодействие компонентов A и B – образование капиллярно-активных и играющих роль самостоятельных структурных единиц интерметаллических соединений типа A_nB_m . Такие квазимолекулярные соединения A_nB_m . (или атомные группировки A_iB_j , A_iB или AB_j , кластеры A_i или B_j), устойчивые при температурах измерений ПН, являются причиной резкого изменения ПН в области состава A_nB_m .
- Существующие в литературе фундаментальные уравнения изотермы ПН позволяют описать монотонные экспериментальные изотермы лишь качественно за исключением некоторых систем, которые близки к идеальным или регулярным растворам. Причиной являются сложность и недостаточно точные определения параметров поверхности x_i^{ω} , a_i^{ω} , a_i , f_i^{ω} , f_i , ω_i^{ω} , V_i^{ω} , и др., которые входят в эти уравнения.

3. Из известных уравнений изотерм ПН экспериментальные изотермы ПН более точно описывает двухпараметрическое уравнение изотермы ПН, предложенное в 2012 году. Оно впервые позволило уточнить и найти важнейший параметр поверхности раствора F из данных эксперимента. Другой параметр уравнения β также находится из данных эксперимента по изучению ПН бинарных расплавов.
4. Показано, что УИПН описывает экспериментальные изотермы ПН с монотонным изменением ПН с высокой точностью (ошибка около 1%), независимо от степени идеальности системы.
5. Из УИПН, при различных приближениях (как частные случаи), могут быть получены известные в литературе уравнения изотермы ПН Фолькмана для идеальных растворов и Прилежаева-Дефай для регулярных растворов. Уравнение изотермы ПН впервые позволило использовать известные точные уравнения В.К Семенченко для расчетов адсорбций и поверхностных концентраций компонентов бинарной системы $A-B$ в приближении реальных растворов.
6. Анализ литературных экспериментальных изотерм ПН бинарных систем $A-B$ показывает, что первая группа изотерм ПН (1.2.) включает четыре типа простейших изотерм ПН, различающихся по значениям: β и F : а) $\beta = 0$ или $F \approx 1$; б) F – мало и $\beta < 0$; в) $\beta < 0$, $F \gg 1$; г) $\beta > 0$ и F равно около 1 или $0 < F \ll 1$. Остальные изотермы ПН (вторая группа, см. п.2.1) являются различными комбинациями этих простейших изотерм ПН. Условие $\beta \approx 1$ мН/м и $F \approx 1$ определяет, что такой раствор по своим свойствам близок к идеальным и его свойства могут быть описаны соответствующими уравнениями.
7. Для аналитического описания сложных экспериментальных изотерм ПН с одним, с двумя или более устойчивыми химическими соединениями типа A_nB_m достаточно исходную бинарную систему $A-B$ разбить на составляющие вторичные: $A-A_nB_m$, $A_nB_m-A_kB_l$, A_kB_l-B и т.д. A_jB_i-B и к каждой вторичной системе применить УИПН в области ее определения по предлагаемой методике.
8. На примерах расчетных изотерм ПН, адсорбций и поверхностных концентраций бинарных растворов $Sb-Se$, $Ag-Te$, $Ni-Al$, $Fe-Ge$, $Pt-B$, $Pb-Hg$, $Al-La$, $Al-Nd$, $In-Bi$, $Mn-Si$ впервые показана роль квазимолекулярных образований (A_nB_m , A_iB_j , A_iB или AB_j , A_i и B_j ($i, j=1,2,3$ и т.д.) в формировании изотерм ПН, адсорбций и поверхностных концентраций компонентов бинарных систем $A-B$. Показано, что устойчивые молекулы химического соединения типа A_nB_m и группировки атомов A_iB_j , A_iB или AB_j , кластеры A_i и B_j могут играть роль самостоятельных структурных единиц расплава наравне с его основными компонентами A и B . Они могут играть роль поверхностно-активных или инактивных компонентов раствора. Например, в системах $Sb-Se$, $Ag-Te$, $Ni-Al$, $Fe-Ge$, $Pt-B$, $Pb-Hg$, $Al-La$, $Al-Nd$, $In-Bi$, $Mn-Si$ химические соединения A_nB_m являются ПА, а в системе $Mn-Si$ химическое соединение Mn_5Si_3 является ПИА веществом.

В перспективе дальнейшей разработки темы:

Таким образом, уравнение изотермы поверхностного натяжения может быть использовано для аналитического описания изотерм ПН бинарных систем с устойчивыми химическими соединениями типа A_nB_m , что имеет важное значение для разработки методики целенаправленной модификации поверхностей расплавов бинарных систем. Для описания изотерм ПН с учетом распада части молекул A_nB_m , по-видимому, расплавы до химического соединения (и после) должны быть рассмотрены как квазитрехкомпонентные, состоящие из компонентов A , B и A_nB_m .

Цитируемая литература:

1. Попель, С.И. Поверхностные явления в расплавах / С.И. Попель. – М: изд-во «Металлургия», 1994. – 432 с.

2. Калажоков, З.Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения расплавов многокомпонентных металлических систем / З.Х. Калажоков, К.В. Зихова, Заур Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Т.М. Таова // Теплофизика высоких температур. – 2012. – Т. 50. № 3. – С. 469–472.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах, в журналах, рекомендованных ВАК РФ:

1. Калажоков, З.Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения, адсорбции и поверхностных концентраций компонентов сплавов системы литий-натрий в твердом состоянии. / З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Р.И. Хацукова, **Э.Х. Шериева** // Межвузовский сборник научных трудов: физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – Тверь: Тверской государ. технический университет (ТГТУ). – 2014. – Вып 6. – С. 133-137.
2. Калажоков, З.Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения, адсорбции и поверхностных концентраций компонентов сплавов системы литий-натрий в твердом состоянии. / З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Н.С. Реуцкая, З.В. Карданова, **Э.Х. Шериева** // Межвузовский сборник научных трудов: физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – Тверь: Тверской государ. технический университет (ТГТУ). – 2015. – Вып 7. – С. 257-262.
3. **Шериева, Э.Х.** К описанию экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных систем металлических сплавов. / **Э.Х. Шериева**, З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков // Вестник АН Чеченской республики. №3 (32). 2016. - С.24-28. (из перечня ВАК).
4. **Шериева, Э.Х.** Адсорбция компонентов расплавов бинарных систем Ag-Te и Sb-Se. / **Э.Х. Шериева**, Н.С. Реуцкая, З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков // Фундаментальные исследования. 2016. №12-1. С.107-111. (из перечня ВАК).
5. **Шериева, Э.Х.** К расчету адсорбции компонентов бинарных систем, в которых образуются устойчивые химические соединения типа A_nB_m . / **Э.Х. Шериева**, Н.С. Реуцкая, З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков // Современные наукоемкие технологии. 2016. № 2-1. С.98-102. (из перечня ВАК).
6. **Шериева, Э.Х.** Расчет адсорбций компонентов бинарных металлических систем при образовании компонентов системы устойчивых химических соединений типа A_nB_m . / **Э.Х. Шериева**, З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Х.Б. Хоконов // Известия РАН. Серия Физическая. 2017. Том 81. № 5. С.680-683. (из перечня ВАК, Scopus).
7. Калажоков, З.Х. Молекулы Mn_5Si_2 и $MnSi$ на поверхности расплавов бинарной системы $Mn-Si$. / З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Б.С. Карамурзов, В.А. Квашин, **Э.Х. Шериева** // Прикладная физика, 2018, №1. С. 58-62. (ВАК, Scopus, Web of Science).
8. **Шериева, Э.Х.** Адсорбция молекул Pt_2B и Sb_2Se_3 в расплавах бинарных систем: $Pt-B$ и $Sb-Se$. / **Э.Х. Шериева** // Известия КБГУ. 2018. Т.8. №4. С. 5-9. (из перечня ВАК).
9. Калажоков, З.Х. Аналитическое описание экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных систем с широким минимумом. / З.Х. Калажоков, **Э.Х. Шериева**, З.В. Барагунова, Н.С. Реуцкая, Х.Х. Калажоков, Л.С. Мусова, Д.А. Жанимова, Т.М. Таова, Х.Л. Хоконов // Труды VII международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» «PSP&PT 7 – 2019», г. Нальчик-п. Приэльбрусье (22-26 октября 2019г.). // Известия КБГУ. 2019. Т.IX. №3. С. 24-29. (из перечня ВАК).
10. Калажоков, З.Х. К методике расчета параметров уравнения изотермы поверхностного натяжения бинарных сплавов. / З.Х. Калажоков, Заур Х.

- Калажоков, З.В. Карданова, Р.И. Хацукова, **Э.Х. Шериева**, Ж.М. Барагунова, Х.Х. Калажоков // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). Нальчик–Ростов-на-Дону–Туапсе, 17–21 сентября 2014 г. РКТС-14. Т.2. 2014. - С.160-164.
11. Калажоков, З.Х. Расчет поверхностных характеристик бинарных сплавов системы литий-натрий в твердом состоянии. / З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, Р.И. Хацукова, **Э.Х. Шериева**, Х.Х. Калажоков // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). Нальчик-Ростов-на-Дону-Туапсе, 17-21 сентября 2014. РКТС-14. Т.2. С.165-169.
12. Калажоков, З.Х. К методике расчета параметров уравнения изотермы поверхностного натяжения бинарных сплавов. / З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, З.В. Карданова, Р.И. Хацукова, **Э.Х. Шериева**, Ж.М. Барагунова, Х.Х. Калажоков // Материалы конференции XIV. Российская конференция. с международным участием по теплофизическим свойствам. (15-17 окт. 2014). ФГБОУ ВПО «КНИТУ» г. Казань, р. Татарстан «РКТС-14». Т.2. 2014. - С.136-140.
13. Калажоков, Х.Х. Уравнение изотермы работы выхода электрона бинарных металлических систем. / Х.Х. Калажоков, З.Х. Калажоков, Б.С. Карамурзов, Заур Х. Калажоков, К.В. Зихова, Р.И. Хацукова, **Э.Х. Шериева** // Труды 18-го международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-18). Ростов-на-Дону-п. Южный, 10-21 сентября 2015г. «РКТС-15». Т.1. №18. С.297-301.
14. Калажоков, Х.Х. К расчету адсорбций компонентов бинарных сплавов металлических систем. / Х.Х. Калажоков, З.Х. Калажоков, Н.С. Реуцкая, Заур Х. Калажоков, Р.И. Хацукова, Ж.М. Барагунова, **Э.Х. Шериева** // Труды 18-го международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-18). Ростов-на-Дону-п. Южный, 10-21 сентября 2015г. «РКТС-15». С. 316-319.
15. Калажоков, Х.Х. К расчету поверхностных концентраций компонентов бинарных сплавов металлических систем. / Х.Х. Калажоков, З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, Л.Б. Мисакова, Р.И. Хацукова, **Э.Х. Шериева** // Труды 18-го международного симпозиума «Упорядочение в минералах и сплавах» (ОМА-18). Ростов-на-Дону-п. Южный, 10-21 сентября 2015г. «РКТС-15». Т.1. №18. С. 320-322.
16. Калажоков, З.Х. Об одном уравнении изотермы поверхностного натяжения расплавов бинарных металлических систем. / З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, **Э.Х. Шериева**, К.В. Зихова, Ж.М. Барагунова, Х.Х. Калажоков, Х.Б. Хоконов // Монография. Под ред. Батаева Д.К.-С. (отв. ред.): Всероссийская научно-практическая конференция «Актуальные проблемы современного материаловедения». г. Грозный, КНИИ РАН. 2015. с. 108-115.
17. **Шериева, Э.Х.** Об одном способе расчета адсорбции компонентов расплавов бинарных металлических систем. / **Э.Х. Шериева**, З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Х.Б. Хоконов // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). Нальчик-Туапсе-п. Южный, (16-21 сентября 2016). РКТС-14. В.6. Т.1. 2016. - С. 69-71.
18. Калажоков, З.Х. Расчет адсорбций компонентов бинарных металлических систем при образовании компонентов системы устойчивых химических соединений типа A_nB_m / З.Х. Калажоков, Заур Х. Калажоков, **Э.Х. Шериева**, Ж.М. Барагунова, Калажоков, Х.Х. // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). Нальчик-Туапсе-п. Южный, (16-21 сентября 2016). РКТС-14. Т.1. 2016. - С.72-76.

19. Калажоков, З.Х. Расчет изотерм адсорбции компонентов бинарных расплавов систем щелочных металлов. / З.Х. Калажоков, Заур Х Калажоков, К.В. Зихова, Ж.М. Барагунова, Н.С. Реуцкая, **Э.Х. Шериева**, Х.Х. Калажоков // Сборник научных трудов АН Чеченской республики № 5, АО «ИПК Грозненский рабочий» - 2016. - С. 211-219.
20. Калажоков, З.Х. Аналитическое описание экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных систем с положительным отклонением от аддитивной прямой. / З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, **Э.Х. Шериева** // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). Нальчик-Туапсе-п. Южный, (16-21 сентября 2017). РКТС-17. В.6. Т.1. 2017. - С. 58-60.
21. Калажоков, З.Х. К определению константы обмена частицами поверхностного слоя бинарного расплава с его объемом. / З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Т.М. Таова, **Э.Х. Шериева** // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). Нальчик-Туапсе-п. Южный, (16-21 сентября 2017). РКТС-17. В.6. Т.1. 2017. - С. 61-64.
22. **Шериева, Э.Х.** Адсорбция молекул Mn_5Si_2 и $MnSi$ на поверхности расплавов бинарной системы $Mn-Si$. / **Э.Х. Шериева**, Н.С. Реуцкая, З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). Нальчик-Туапсе-п. Южный, (16-21 сентября 2017). РКТС-17. В.6. Т.1. 2017. - С.65-67.
23. **Шериева, Э.Х.** Расчет адсорбции молекул Pt_2B и Fe_3Ge в расплавах бинарных систем $Pt-B$ и $Fe-Ge$. / **Э.Х. Шериева** // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы» (ФПЯ и ФП). г. Нальчик-г. Туапсе-п. Южный, (16-21 сентября 2017). РКТС-17. В.6. Т.1. 2017. - С.201-203.
24. Калажоков, З.Х. Аналитическое описание экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных систем с положительным отклонением от аддитивной прямой. / З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, **Э.Х. Шериева** / Электронный журнал «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». <http://pti-nt.ru> 2018, №2, С.42.
25. Калажоков, З.Х. К определению константы обмена частицами поверхностного слоя бинарного расплава с его объемом. / З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, Т.М. Таова, **Э.Х. Шериева** / Электронный журнал «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». <http://pti-nt.ru> 2018, №2, С.46.
26. **Шериева, Э.Х.** Адсорбция молекул Mn_5Si_2 и $MnSi$ на поверхности расплавов бинарной системы $Mn-Si$. / **Э.Х. Шериева**, Н.С. Реуцкая, З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков Электронный журнал «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». <http://pti-nt.ru> 2018, №2, С. 48.
27. Калажоков, З.Х. Влияние продуктов химических реакций компонентов расплава на его поверхностное натяжение. / З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, **Э.Х. Шериева** / Труды VIII международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» «PSP&PT 8 – 2018», г. Нальчик-г. Ростов-на-Дону-г. Грозный - п. Шепси (12-16 сентября 2018). 2018. В. 8. С. 61-63.
28. Калажоков, З.Х. К аналитическому описанию экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных металлических систем компоненты, которых образуют устойчивые химические соединения. / З.Х. Калажоков, Х.Х. Калажоков, **Э.Х. Шериева** // XV Российская научная конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-15) и научная школа молодых ученых. ОИВТ АН, МЭИ. 15-19 октября 2018г. Москва. 2018. Выпуск 8. Т.1. С. 74-75.

29. Калажоков, З.Х. Уравнение изотермы поверхностного натяжения бинарных металлических систем. / Калажоков З.Х., Калажоков Х.Х., **Э.Х. Шериева** // XV Российская научная конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (РКТС-15) и научная школа молодых ученых. ОИВТ АН, МЭИ. 15-19 октября 2018г. Москва. 2018. Выпуск 8. Т.1. С. 120-121.