

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»

На правах рукописи



Тикина Ирина Владимировна

**ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖИДКОМЕТАЛЛИЧЕСКОГО
ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ СИСТЕМЫ
Bi-Pb-Sn-Cd**

01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Екатеринбург- 2020

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Уральский институт Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий» на кафедре пожарной тактики и службы

Научный руководитель: доктор технических наук, доцент
Барбин Николай Михайлович

Официальные оппоненты: **Сидоров Валерий Евгеньевич**,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВО «Уральский государственный педагогический университет», г. Екатеринбург,
директор Научно-образовательного центра «Расплав»;

Савватимский Александр Иванович,
доктор технических наук, старший научный
сотрудник, ФГБУН Объединенный институт
высоких температур Российской академии наук,
г. Москва, главный научный сотрудник
лаборатории широкодиапазонных уравнений
состояния;

Ивлиев Андрей Дмитриевич,
доктор физико-математических наук,
профессор, ФГАОУ ВО «Российский
государственный профессионально-педагогический университет», г. Екатеринбург,
профессор кафедры математических и
естественнонаучных дисциплин

Защита состоится 09 октября 2020 г. в 10:00 ч. на заседании диссертационного совета УрФУ 05.05.12 по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, ауд. И-420 (зал Ученого совета).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», <https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?d=12&rid=1213>

Автореферат разослан « ____ » _____ 2020 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Аронсон Константин Эрленович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Жидким металлам и сплавам в последние годы наука уделяет особое внимание ввиду широкой возможности их применения. Для целей использования жидких металлов, в качестве теплоносителей эффективно отводящих тепло из активных зон реактора применяют металлы с относительно низкой температурой плавления (натрий, литий, калий, свинец, олово, висмут), высокой температурой кипения, относительно высокой теплопроводностью, малой вязкостью и другими подходящими физическими свойствами. Низкое давление пара при высоких температурах позволяет использовать многие металлы в качестве теплоносителя в особо напряженных условиях при температурах 700-800°C, когда все другие вещества (вода, органические соединения) не пригодны.

В последние годы активно прорабатываются концепции использования тяжелых жидкометаллических теплоносителей [ТЖМТ], так как они удовлетворяют требованиям обеспечения безопасности. Применение ТЖМТ позволяет исключить такие тяжелые аварии, как «разгон» реактора на мгновенных нейтронах, потерю теплоносителя, химические взрывы и пожары при разгерметизации реакторного контура, разрыв корпуса реактора под действием сил внутреннего давления, исключить расплавление элементов активной зоны при полном обесточивании энергоблока на время около 5 суток.

По критериям безопасности все ТЖМТ, безусловно, превосходят литиевые жидкометаллические теплоносители, что побуждает проводить дальнейшие исследования в этой области.

Система Bi-Sn-Pb-Cd применяется в закалочных печах, технологических установках (переработка отравляющих веществ), системах пожаротушения. Выбор данной системы с целью применения её в качестве тяжелого жидкометаллического теплоносителя обусловлен следующими обстоятельствами: данный сплав обладает низкой температурой плавления ($\approx 70^\circ\text{C}$) и высокой температурой кипения ($\approx 1700^\circ\text{C}$), содержит в своем составе Pb, Sn, Bi.

Для целей использования расплава в качестве теплоносителя необходимы знание по теплофизическим свойствам, которые определяются составом расплава в конденсированной и паровой фазе.

Степень разработанности темы исследования. Проблемами использования тяжелых жидкометаллических теплоносителей в атомной энергетике занимались: Боришанский В.М., Кутателадзе С.С., Новиков И.И., Фердынский О.С., Кириллов П.Л., Хорасанов Г.Л., Самохин Д.С., Зевякин А.С.,

Земсков Е.А., Блохин А.И., Безносков Л.В., Драгунов Ю.Г., Боков А.В., Рачков В.И., Кащеев М.В., Кузнецов И.А., Сорокин А.П., Кузин Ю.А., Легких А.Ю., Лаврова О.В., Жуков А.В., Загорулько Ю.И., Орлов Ю.И., Труфанов А.А., Камаев А.А. и др. Термодинамические исследования металлических расплавов проводили Taylor N.W., Elliot J., Никольская А.В., Герассимова Я.И., Швидковский Е.Г., Горяга Г.И., Станкус С.В., Савватимский А.И., Онуфриев С.В., Конюхов С.А., Мубояджян С.А., Середкин Н.Н., Хайрулин Р.А., Абдулаев Р.Н., Агаджанов А.Ш., Талуц С.Г., Ивлиев А.Д., Мешков В.В., Коршунов И.Г., Горбатов В.И., Полев В.Ф., Глагольева Ю.В. и др. Исследовали сплавы различных систем методом термодинамического моделирования: Моисеев Г.К., Трусов Б.Г., Ватолин Н.А., Сидоров В.Е., Ильиных Н.И., Куликова Т.В., Тереньев Д.И. и др.

Цель работы: исследование термических свойств расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd в атмосфере Ar , и воздуха при нагревании до высоких температур с целью применения его в качестве теплоносителя.

В соответствии с поставленной целью были сформированы следующие **задачи:**

1. провести обзор, посвященный степени исследования расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd . Выявить возможность образования в расплаве металлических соединений и оксидных соединений, оценить их теплофизические характеристики;

2. получить термограммы нагрева и охлаждения сплава системы Bi-Pb-Sn-Cd ;

3. выполнить термодинамическое моделирование: а) термических процессов в расплаве системы Bi-Pb-Sn-Cd в атмосфере Ar и окислительной атмосфере; б) термических процессов в индивидуальных интерметаллических соединениях в инертной атмосфере и окислительной атмосфере;

4. оценить константы равновесия реакций термической диссоциации, протекающих в расплаве системы Bi-Pb-Sn-Cd и реакций диссоциации индивидуальных интерметаллических соединений в инертной и окислительной атмосферах;

5. рассчитать теплофизические свойства и температуры фазовых переходов: расплав системы Bi-Pb-Sn-Cd – инертная атмосфера; расплав системы Bi-Pb-Sn-Cd – окислительная атмосфера; интерметаллическое соединение – инертная атмосфера; интерметаллическое соединение – окислительная атмосфера.

Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующих результатах:

1. впервые определены теплофизические характеристики (энтальпия, энтропия) расплавленной системы Bi-Pb-Sn-Cd состоящей из бинарных и тройных металлических соединений в интервале температур 300-3000К и давлений $10^2 - 10^7$ Па;

2. рассчитаны теплофизические свойства бинарных и тройных соединений PbSn, CdSn, SnBi, BiPb, Cd₃Bi₂, Bi₂Sn₃, Bi₅Pb₃, Bi₇Pb₃, Bi₇Pb, Pb₃Bi₄, Pb₃Bi, PbSn₃, Sn₂Bi₄, Sn₃Bi, Sn₄Bi₂, Sn₅Bi, Sn₁₀Bi₃, SnBi₅, Pb₂Bi₄Sn₄, Pb₂Bi₇Sn₄, Pb₃Bi₄Sn₄, Pb₃Bi₉Sn₄, Pb₃BiSn₄, Pb₅Bi₄Sn₄, Pb₇Bi₄Sn₄, PbBi₂Sn₂, PbBi₄Sn₄, Pb₉Bi₄Sn₄. Pb₃Bi₄Sn₁₅;

3. проведено термодинамическое моделирование термического разложения бинарных и тройных соединений, указанных выше, в интервале температур 300-3000К и давлений от 10^2 до 10^7 Па в атмосфере Ar и воздуха;

4. исследованы температурные зависимости равновесного состава и теплофизические характеристики расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd в атмосфере Ar и воздуха в интервале температур 300-3000К и давлений от 10^2 до 10^7 Па;

5. исследованы температурные зависимости парциальных давлений компонентов паровой фазы, образующейся при равновесном нагревании над расплавом системы Bi-Pb-Sn-Cd, а также термическом разложении индивидуальных соединений в широком интервале температур и давлений в атмосфере Ar и воздуха.

Теоретическая и практическая значимость. С помощью метода термодинамического моделирования определен состав расплава в конденсированной и паровой фазе при его нагреве. Рассчитаны теплофизические свойства необходимые для практического использования расплава в качестве теплоносителя.

Основные научные положения диссертационного исследования могут пополнить справочные данные.

Методология и методы исследования. Для исследования расплава использовались методы: термического анализа, электронной микроскопии (сканирующий электронный микроскоп JSM-5900 LV с приставкой электронно-зондового микроанализатора) и термодинамического моделирования (программный комплекс TERRA).

Основные положения, выносимые на защиту:

- результаты термического анализа расплава Bi-Pb-Sn-Cd;
- теплофизические свойства системы расплав (Bi-Pb-Sn-Cd) – пар при различных давлениях;
- теплофизические свойства бинарных и тройных индивидуальных

интерметаллических соединений – пар при различных давлениях;

– теплофизические свойства расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd в окислительной атмосфере при различных давлениях;

– теплофизические свойства бинарных и тройных индивидуальных интерметаллических соединений в окислительной атмосфере при различных давлениях.

Достоверность результатов обеспечивается использованием современных математических методов и программных комплексов, апробированных методик измерений при проведении экспериментальных исследований, хорошим согласием полученных результатов с экспериментальными данными.

Апробация работы. Основные результаты исследований представлены на семинарах и конференциях: XIV Российском семинаре «Компьютерное моделирование Физико-химических свойств стекол и расплавов», г. Курган 2018 г.; V Всероссийской конференции с элементами научной школы для молодых ученых «Метастабильные состояния и флуктуационные явления» г. Екатеринбург, 2017 г.; XII Международной научно-технической конференции «Современные металлические материалы и технологии» г. Санкт-Петербург, 2017 г.; Satellite Conference of XX Mendeleev Congress on general and applied chemistry «Ab initio based modeling of advanced materials АММ-2016»; XIII Российский семинар «Компьютерное моделирование Физико-химических свойств стекол и расплавов», г. Курган 2016 г.; III Международной научно-практической конференции «Современные методы и средства исследований теплофизических свойств веществ» г. Санкт-Петербург, 2015 г.; IV и V Международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы» Нальчик – Ростов-на-Дону– Грозный - пос. Южный, 2014, 2015 г.; XI Международной научно-технической конференции «Современные металлические материалы и технологии» г. Санкт-Петербург, 2015 г.; Международной научно-технической конференции «Нанотехнологии функциональных материалов» г. Санкт-Петербург, 2014 г.; XIII Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ (с международным участием) г. Новосибирск, 2011 г.; Международной научно-технической конференции «Современные металлические материалы и технологии» г. Санкт-Петербург, 2011 и 2017гг.; Международной научной конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела» г. Минск, 2011 г.; VI Всероссийской научно-технической конференции «Физические свойства металлов и сплавов» г. Екатеринбург, 2011 г.; II Всероссийской научно-практической конференции с

международным участием «Пожарная безопасность: проблемы и перспективы» г. Воронеж, 2011 г.

Личный вклад автора. Анализ литературных данных, проведение экспериментов, моделирование, анализ полученных результатов и их интерпретации, подготовка научных публикаций.

Публикации. По материалам диссертации опубликована 31 научная работа, включая 7 статей в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК и Аттестационным советом УрФУ, из них 5 публикаций, входят в международную базу данных Scopus и Web of Science.

Структура и объем работы. Диссертация содержит 125 страниц основного текста (введение, 4 главы с выводами, заключение по работе), 60 рисунков, 28 таблиц и 2 приложения на 30 листах. Список литературных источников содержит 120 наименований. Общий объем диссертации 155 страниц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность работы, сформирована цель и научная новизна, теоретическая и практическая значимость результатов исследований, основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе проведен анализ степени исследования системы Bi-Pb-Sn-Cd, и родственных по составу бинарных и тройных систем: Pb-Bi, Cd-Bi, Sn-Bi, Cd-Sn, Sn-Pb-Bi, Cd-Pb. Показана возможность существования в расплаве 29 металлических соединений, которые могут оказывать влияние на свойства системы Bi-Pb-Sn-Cd: PbSn, CdSn, SnBi, BiPb, Cd₃Bi₂, Bi₂Sn₃, Bi₅Pb₃, Bi₇Pb₃, Bi₇Pb, Pb₃Bi₄, Pb₃Bi, PbSn₃, Sn₂Bi₄, Sn₃Bi, Sn₄Bi₂, Sn₅Bi, Sn₁₀Bi₃, SnBi₅, Pb₂Bi₄Sn₄, Pb₂Bi₇Sn₄, Pb₃Bi₄Sn₄, Pb₃Bi₉Sn₄, Pb₃BiSn₄, Pb₅Bi₄Sn₄, Pb₇Bi₄Sn₄, PbBi₂Sn₂, PbBi₄Sn₄, Pb₉Bi₄Sn₄. Pb₃Bi₄Sn₁₅.

В атмосфере воздуха показана возможность образования 23-х сложных оксидных соединений: PbBi₁₂O₁₉, Pb₂Bi₆O₁₁, Pb₅Bi₈O₁₇, Pb₃Bi₂O₆, Bi₂PbO₄, Bi₄PbO₇, Bi₁₂PbO₂₀, Pb₇Bi₆O₁₆, PbBi₈O₁₃, Pb₂Bi₂O₅, PbSnO₃, PbSnO₄, Bi₁₂CdO₁₉, Bi₄CdO₇, Cd₃Bi₁₀O₁₈, Bi₂CdO₄, Bi₂Sn₂O₇, CdPbO₃, Cd₂PbO₄, CdPb₂O₅, CdSnO₃, Cd₂SnO₄, CdSnO₂ и 9-ти простых: Pb₃O₄, Pb₂O₃, PbO₂, PbO, SnO₂, SnO, Bi₂O₃, BiO, CdO.

Во второй главе проведен термический анализ нагрева системы 42.0масс. % Bi - 40.6масс. % Pb - 10.0масс. % Sn - 7.4масс. % Cd.

Проведено две серии экспериментов. В первой серии экспериментов исходные образец сплава нагревали до 150°C (образец №1), во второй серии экспериментов образец нагревали до 500°C (образец №2). По результатам

эксперимента построены термограммы нагрева и охлаждения, по которым определены температуры плавления эвтектики и полного плавления. Для образца №1 эндотермический пик, обусловленный плавлением эвтектики в сплаве, наблюдается при 72°C. Процесс полного плавления заканчивается при 108°C. Для образца №2 температура полного плавления составила 104°C. Наиболее интенсивное выделение кристаллов из жидкой фазы происходит в интервале 109-103°C, а при 69°C наблюдается кристаллизация эвтектики.

Микроструктуру закристаллизованных образцов №1 и №2 (представленную на рисунке 1) исследовали с помощью сканирующего электронного микроскопа JSM-5900LV с приставкой электронно-зондового микроанализатора.

Данные по составу представлены в таблице 1.

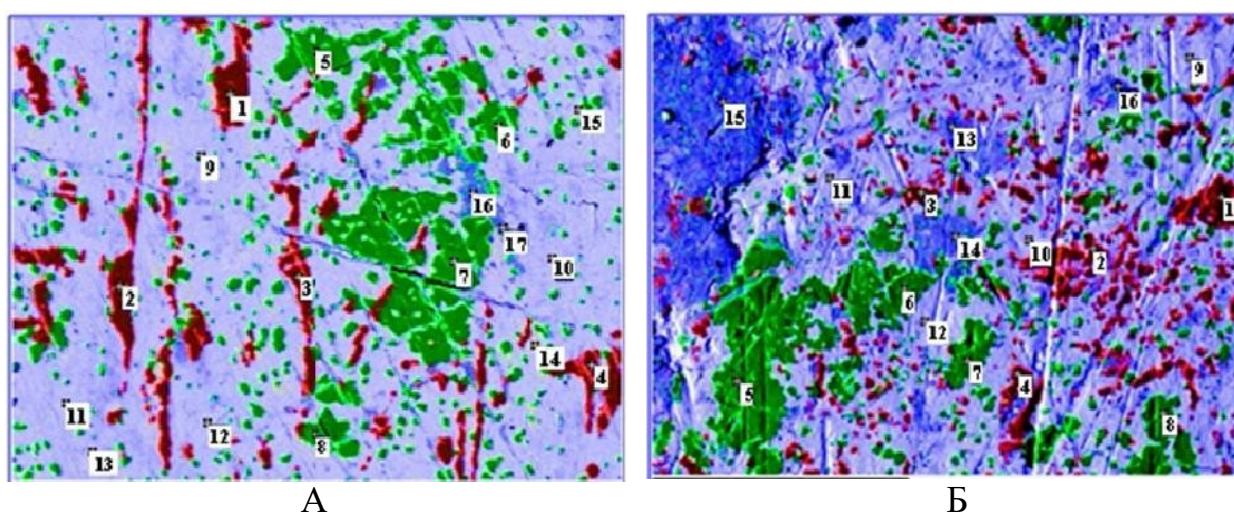


Рисунок 1 – Микроструктура образцов системы Bi-Sn-Pb-Cd после нагрева: А) до 150°C; Б) до 500°C (цифрами указаны точки, в которых определен локальный химический состав).

Результаты термического и микрорентгеноспектрального анализа позволяют предположить возможность существования в расплаве кроме атомов Bi, Pb, Sn, Cd металлических соединений, которые могут присутствовать в нем в виде кластеров.

Таблица 1 – Состав микроструктуры образцов системы 42.0масс. % Bi - 40.6масс. % Pb - 10.0масс% Sn - 7.4масс% Cd

№ точки на рис. 1(А)	150° С				№ точки на рис. 1(Б)	500° С			
	Cd, %	Sn, %	Bi, %	Pb, %		Cd, %	Sn, %	Bi, %	Pb, %
1-4	97,29	0,55	1,37	0,79	1-4	96,18	0,62	2,15	1,05
5-8	0,97	94,56	0,63	3,84	5-8	1,21	93,34	1,65	3,80
9-13	1,05	4,12	64,32	30,51	9-12	1,18	4,41	61,69	32,72
14-15	1,07	2,70	1,35	94,88	13-16	12,19	21,02	42,92	23,87
16-17	13,31	21,95	43,08	21,66					

В третьей главе описана методика термодинамического моделирования. Рассчитаны теплофизические свойства соединений входящих в расплав системы Bi-Pb-Sn-Cd с использованием полуэмпирических методов, модели Миедемы и аддитивных методов. Фрагмент результатов расчетов приведен в таблице 2.

Таблица 2 – Расчетные значения теплофизических свойств соединений (фрагмент)

соединение	A	B	E	C	C_{p298} , Дж/(К*кг)	$\Delta_f H^0_{298}$, Дж/моль	S_{298}^0 , Дж/ (моль*К)	$H_{298}^0 - H_0$ Дж/моль
	$C_p(T)$, Дж/(моль*К)							
Sn ₂ Bi ₄	90,58	158,06	16,42	0,00	154,13	1472,67	329,33	22977,05
Sn ₄ Bi ₂	110,07	133,32	8,21	0,00	158,03	1610,08	318,25	23558,82
Sn ₅ Bi	119,82	120,95	4,11	0,00	159,98	860,30	312,71	23849,71
Pb ₂ Bi ₇ Sn ₄	217,76	303,08	28,74	0,00	336,86	1652,31	731,50	50217,39
PbBi ₂ Sn ₂	91,11	105,84	8,21	0,00	130,87	1889,21	280,65	19509,88
Pb ₂ Bi ₄ Sn ₄	182,21	211,68	16,42	0,00	261,75	1871,71	561,29	39019,75

$\Delta_f H^0_{29}$ - стандартная энтальпия образования (далее СЭО) при 298,15 К; S^0_{298} - стандартная энтропия (далее СЭ) при 298,15 К; $H^0_{298} - H^0_0$ - изменение энтальпии при нагреве системы от 0 до 298,15 К; T - температура плавления сплава; $C_p(T)$ - температурная зависимость удельной теплоемкости при постоянном давлении 0,1 МПа.

Рассчитанные значения стандартной энтальпии образования (СЭО) ряда соединений: SnBi, SnBi₅, Sn₂Bi₄, Sn₄Bi₂, CdSn, PbSn согласуются с имеющимися экспериментальными данными в пределах 15% (Таблица 3).

Таблица 3 – Сводная таблица экспериментальных и расчетных данных по стандартной энтальпии образования соединений

СЭО, кДж/ моль	SnBi	SnBi ₅	Sn ₂ Bi ₄	Sn ₄ Bi ₂	CdSn	PbSn
$\Delta_f H^0_{298}$, (расч.)	1,84	0,77	1,47	1,61	-3,65	-1,28
$\Delta_f H^0_{298}$, *	1,55	0,72	1,42	1,76	-3,64	-1,13

*- Villars P., Calvert L.D. Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases. - Ohio: Metals Park, 1985, p.1 - 3.

Ввиду слабой изученности расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd проведено апробирование метода термодинамического моделирования на хорошо изученном сплаве Pb(45%) - Bi(55%). Расплав представлен моделью идеального раствора продуктов взаимодействия. В состав расплава входят конденсированные: Bi, Pb, Pb₃Bi₄, PbBi, Pb₃Bi₅, Pb₃Bi₇, PbBi₇. В состав паровой фазы: Bi, Bi₂, Bi₃, Bi₄, Pb, Pb₂, а также электронный газ, ионизированные пары свинца и висмута. Результаты термодинамического моделирования показали хорошее согласие с экспериментальными данными по значениям парциального давления пара, теплоемкости, энтальпии и теплопроводности.

Произведен расчет теплофизических свойств 23 двойных оксидных соединений ввиду их слабой изученности. Стандартная энтропия, стандартная

теплоемкость и стандартная энтальпия образования рассчитывалась аддитивно по правилу Неймана-Коппа с использованием данных по простым оксидам. Информация о теплофизических свойствах простых оксидов заимствована из *HSC CHEMISTRY Ver 4.0 Copyright (c) Outokumpu Research Oy. Pori, Finland, A. Roine (www. Outokumpu. com/hsc) ISBN 952-9507-05-4*. Фрагмент рассчитанных свойства сложных оксидных соединений представлен в таблице 4.

Таблица 4 – Теплофизические свойства сложных оксидных соединений

Соединение	ΔH_{298}° , Дж/моль*К	S_{298}° , Дж/моль* К	C_p , Дж/(моль*К)			$C_p^0_{298}$, Дж/моль* К	$H_{298}^{\circ}-H_0$ кДж/моль
			a	$b*10^{-3}$	$c*10^5$		
PbBi ₁₂ O ₁₉	-3966,30	977,68	749,16	183,34	64,69	734,79	108,28
Pb ₂ Bi ₆ O ₁₁	-2334,32	591,89	400,89	126,16	-5,77	431,99	64,37
Pb ₅ Bi ₈ O ₁₇	-3659,69	949,48	639,94	198,32	-14,44	682,79	101,74
Pb ₃ Bi ₂ O ₆	-1324,37	357,59	239,05	72,13	-8,66	250,79	37,37
Bi ₂ PbO ₄	-856,14	220,20	148,69	46,36	-2,89	159,25	23,73
Bi ₄ PbO ₇	-1534,58	371,69	79,831	-2,89	-0,01	100,37	14,96
Bi ₁₂ PbO ₂₀	-4038,76	980,78	684,29	231,85	-8,98	743,27	110,75
Pb ₇ Bi ₆ O ₁₆	-3504,88	935,37	626,79	190,63	-20,21	660,83	98,47
PbBi ₈ O ₁₃	-2722,24	674,69	459,23	146,78	-2,89	499,72	74,46
Pb ₂ Bi ₂ O ₅	-1010,01	288,89	193,87	59,25	-5,78	205,02	30,55

Значения теплофизических свойств ряда сложных оксидных соединений: PbBi₁₂O₁₉, Pb₅Bi₈O₁₇, Pb₂Bi₆O₁₁, Pb₃Bi₂O₆, полученные расчетными методами, сходятся с экспериментальными данными (таблица 5) в пределах 10%, что позволяет использовать расчетные методы для оценки теплофизических свойств сложных оксидных соединений.

Таблица 5 – Сравнительная таблица теплофизических свойств ряда сложных оксидных соединений

соединение	PbBi ₁₂ O ₁₉	Pb ₅ Bi ₈ O ₁₇	Pb ₂ Bi ₆ O ₁₁	Pb ₃ Bi ₂ O ₆
$C_p^0_{298}$, Дж/(моль*К)	734,79	682,79	431,99	250,79
C_p_{298} , Дж/(моль*К) *	672,19	603,47	-	-
$C_p^0_{298}$, Дж/(моль*К) **	730,95	693,67	439,71	258,50
ΔH°_{298} , Дж/(моль*К)	-3966,30	-3658,69	-2334,32	-1324,37
ΔH°_{298} , Дж/(моль*К) **	-3966,28	-3658,66	-2334,30	-1324,36

* - Ganesan R., Venkatakrishnan R., Asuvathraman R., Nagarajan K., Gnanasekaran T., Srinivasa R.S. Heat capacities of PbBi₁₂O₁₉ (s) and Pb₅Bi₈O₁₇ (s) // J. Thermochimica Acta. 2005. № 439. P. 27

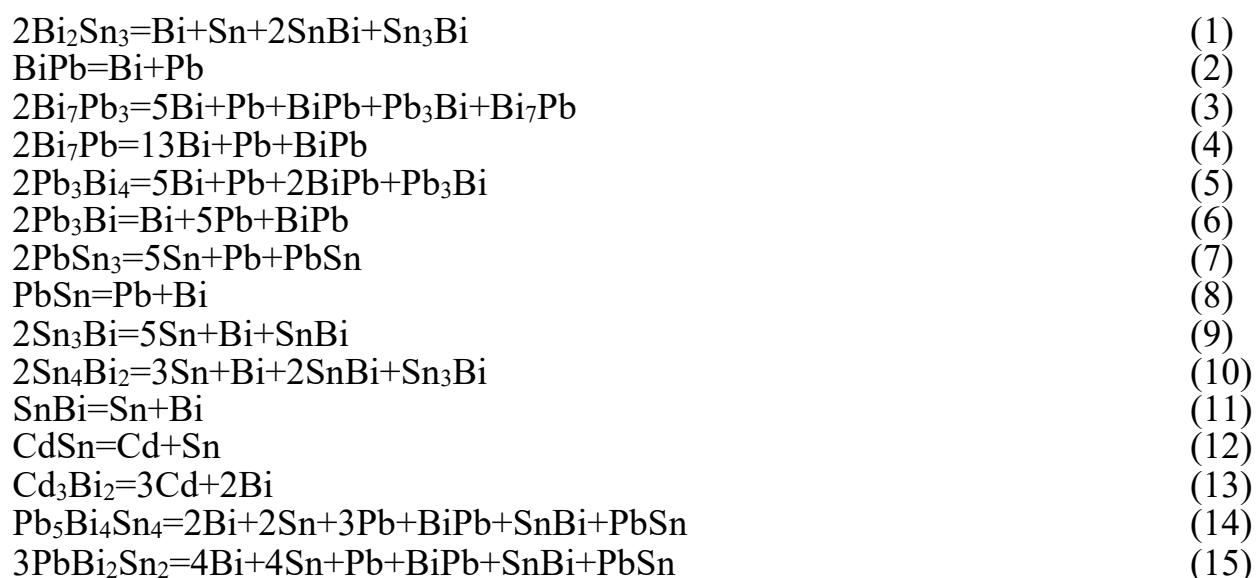
** - Н.В.Белоусова, Е.О. Архипова Расчет теплофизических свойств висмутатов свинца Journal of Siberian Federal University/ Chemistry 3 (2009 2) 254-258

В четвертой главе произведено моделирование термических процессов происходящих в расплаве системы Ar-42.0масс.% Bi - 40.6масс.% Pb -

10.0масс% Sn - 7.4масс% Cd при различных условиях с учетом возможности образования 29 металлических соединений: PbSn, CdSn, SnBi, BiPb, Cd₃Bi₂, Bi₂Sn₃, Bi₅Pb₃, Bi₇Pb₃, Bi₇Pb, Pb₃Bi₄, Pb₃Bi, PbSn₃, Sn₂Bi₄, Sn₃Bi, Sn₄Bi₂, Sn₅Bi, Sn₁₀Bi₃, SnBi₅, Pb₂Bi₄Sn₄, Pb₂Bi₇Sn₄, Pb₃Bi₄Sn₄, Pb₃Bi₉Sn₄, Pb₃BiSn₄, Pb₅Bi₄Sn₄, Pb₇Bi₄Sn₄, PbBi₂Sn₂, PbBi₄Sn₄, Pb₉Bi₄Sn₄. Pb₃Bi₄Sn₁₅. Погрешность данных полученных с помощью программного комплекса TERRA определяется только погрешностями в определении теплофизических свойств соединений и элементов участвующих в процессе моделирования и не превышает 15%.

По результатам моделирования установлено присутствие в системе Ar-42.0масс.% Bi - 40.6масс.% Pb - 10.0масс% Sn - 7.4масс% Cd: а) 15 металлических соединений из 29 возможных: BiPb, PbSn, SnBi, Pb₃Bi, Pb₅Bi₄Sn₄, PbSn₃, Bi₂Sn₃, Bi₇Pb, CdSn, Sn₃Bi, PbBi₂Sn₂, Pb₃Bi₄, Cd₃Bi₂, Bi₇Pb₃, Sn₄Bi₂; б) металлы: Pb, Bi, Sn, Cd.

Оценены константы равновесия следующих термических реакций:



Зависимость констант равновесия реакций термической диссоциации (1)–(15) от температуры описывали уравнением вида:

$$\ln K = A/T + B \quad (16)$$

где A и B – индивидуальные постоянные коэффициенты, характерные для данной реакции. Сводные графики значений lnK для 2-х и 3-х соединений в атмосфере Ar при P=10⁵ Па приведены на рисунке 2.

В ходе моделирования в составе паровой фазы учтены пары: Pb, Bi, Cd, Sn, Pb₂, Bi₂, Bi₃, Bi₄, Sn₂, Cd₂, электронный газ, ионизированные пары свинца, висмута, кадмия и олова.

Используя графики балансов Bi, Pb, Sn, Cd определены температуры полного испарения и начала испарения металлов из сплавов в зависимости от

давления. В таблице 6 представлены значения температур полного испарения ($T_{\text{пи}}$), начала испарения ($T_{\text{ни}}$) и интервала испарения ($T_{\text{пи}}-T_{\text{ни}}$) металлов из расплава (фрагмент для 10^5 Па).

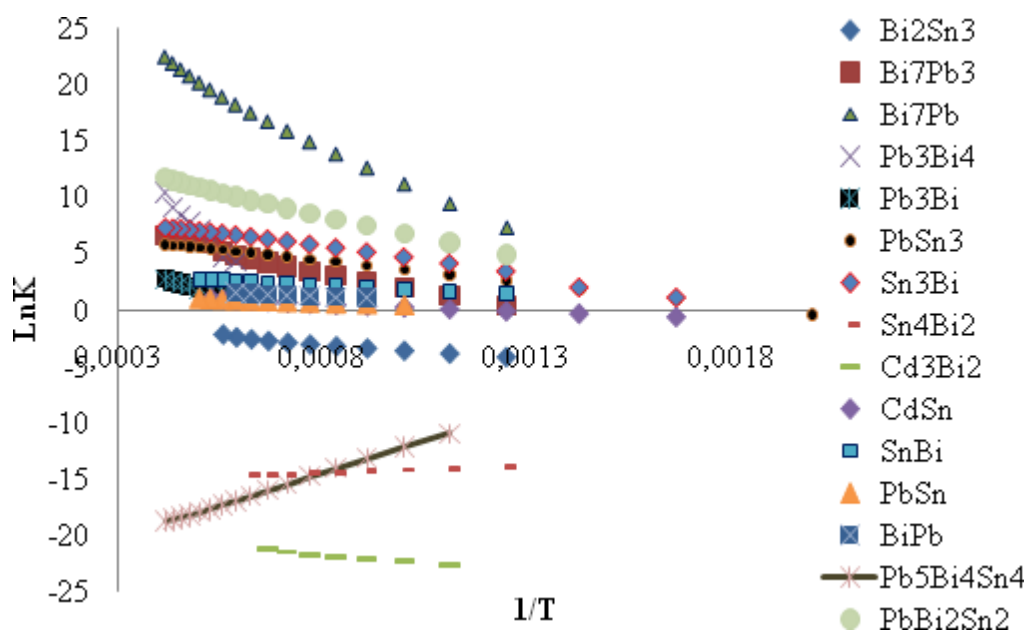


Рисунок 2 – Сводные графики значений $\text{Ln}K$ для 2-х и 3-х соединений в расплаве системы Ar- 42.0масс. % Bi - 40.6масс. % Pb - 10.0масс. % Sn - 7.4масс. % Cd при 10^5 Па.

Таблица 6 – Значения температур полного испарения ($T_{\text{пи}}$), начала испарения ($T_{\text{ни}}$) и интервала испарения ($T_{\text{пи}}-T_{\text{ни}}$) металлов из расплава при $P=10^5$ Па

Элемент		$T_{\text{пи}}$, К	$T_{\text{ни}}$, К	$T_{\text{пи}}-T_{\text{ни}}$, К
Bi	$P=10^5$ Па	2510	1550	960
Pb		2510	1450	1060
Cd		2200	1200	1000
Sn		2510	1950	560

С применением программного комплекса TERRA произведен расчет теплофизических характеристик системы Ar-42.0масс. % Bi - 40.6масс. % Pb - 10.0масс. %Sn - 7.4масс. %Cd при давлениях 10^2-10^7 Па. В таблице 7 представлены значения теплофизических характеристик в температурном интервале 300-3000 К для $P=10^5$ Па.

На рисунках 3 и 4 представлена зависимость равновесной удельной теплоемкости системы 42,0 Bi+40,6 Pb+10,0 Sn+7,4Cd (в масс. %) при нагреве в атмосфере Ar и воздуха.

В температурном интервале 500-900К для атмосферного давления происходит распад BiPb, SnBi, PbSn с высвобождением Bi, Sn, Pb. При 1700-

2100К наблюдается интенсивный спад значений C_p , обусловленный распадом Cd_3Bi_2 и испарением Bi , Sn , Pb с образованием паров Bi , Bi_2 , Sn , Pb , Cd . Отмечается рост кривой при 800-1700К, который обусловлен преимущественно образованием соединений.

Таблица 7 – Теплофизические характеристики системы
 Ag-42,0 Bi+40,6 Pb+10,0 Sn+7,4Cd (в масс. %) при 300-1500К и $P=10^5$ Па

T, К	S, кДж/(моль*К)	I, кДж/кг	U, Дж/кг	C_p , кДж/(кг*К)	λ , кВт/(м*К)
300	0,48551	0,832	0,82	0,15189	0,009
400	0,53329	17,500	17,08	0,17026	0,011
500	0,57823	38,017	37,18	0,16943	0,013
600	0,61013	55,511	54,25	0,17016	0,015
700	0,63711	73,015	71,34	0,17261	0,016
800	0,68339	102,99	100,91	0,16821	0,018
900	0,70377	120,29	117,79	0,16972	0,019
1000	0,72213	137,73	134,80	0,17146	0,020
1100	0,73897	155,40	152,06	0,17333	0,022
1200	0,75468	173,45	169,69	0,17525	0,023
1300	0,76963	192,14	187,91	0,17715	0,024
1400	0,78427	211,90	207,16	0,17894	0,025
1500	0,79929	233,69	228,31	0,18051	0,025

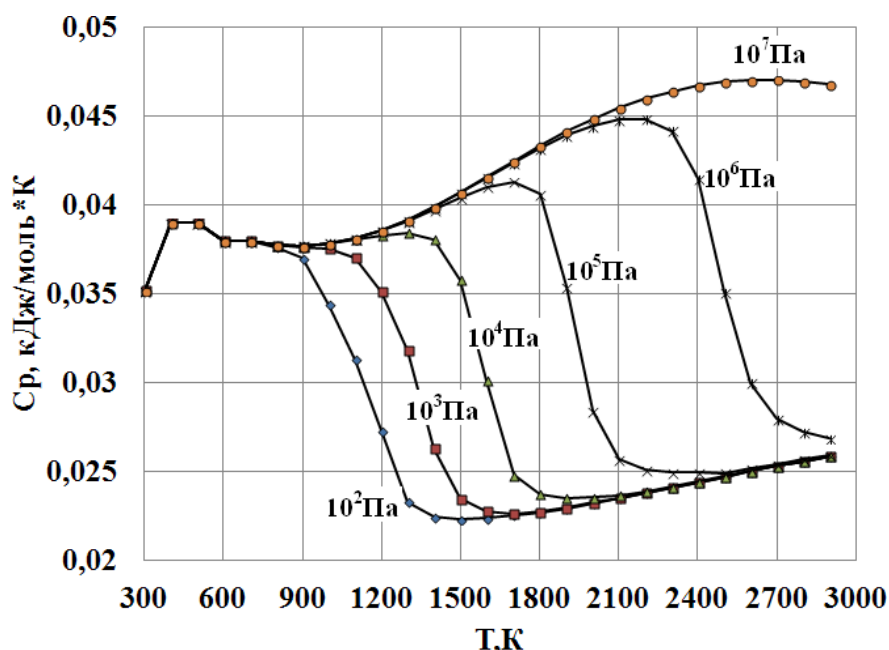


Рисунок 3 – Зависимость равновесной удельной теплоемкости системы в процессе нагрева при различных давлениях в атмосфере Ag для различных давлений

В случае воздушной атмосферы при давлении 10^5 Па в температурном интервале 800-900К происходит испарение Bi и распад $CdSnO_3$, CdO , $BiPb$, PbO , $PbSnO_3$, Cd_3Bi_2 с образованием $Pb_2Bi_2O_5$ и высвобождением паров Bi , SnO , Sn_2O_2 , Pb . Второй интенсивный спад значений C_p , наблюдается на

участке 1900-2100К, обусловлен он испарением Bi и распадом Cd_3Bi_2 , SnO с образованием паров Bi , SnO и Sn_2O_2 .

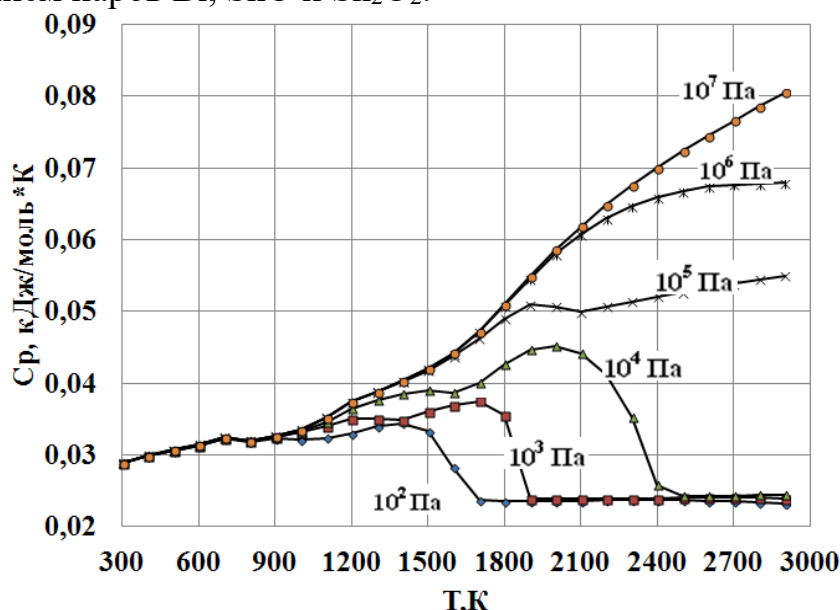


Рисунок 4 – Зависимость равновесной удельной теплоемкости системы в процессе нагрева при различных давлениях в атмосфере воздуха для различных давлений

На рисунках 5 и 6 представлены зависимости коэффициента теплопроводности от температуры при нагреве для различных давлений в атмосфере Ar и воздуха.

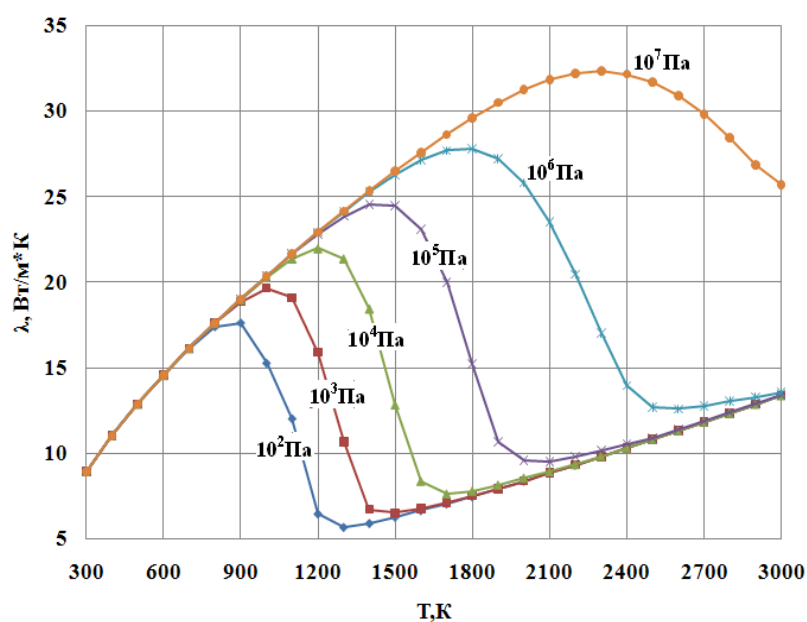


Рисунок 5 – Изменение коэффициента теплопроводности при нагреве для различных давлений в атмосфере Ar

В случае использования расплава Bi-Pb-Sn-Cd в качестве жидкометаллического теплоносителя при выборе параметров эксплуатации следует учитывать, что увеличение равновесного давления приводит к повышению температуры испарения расплава.

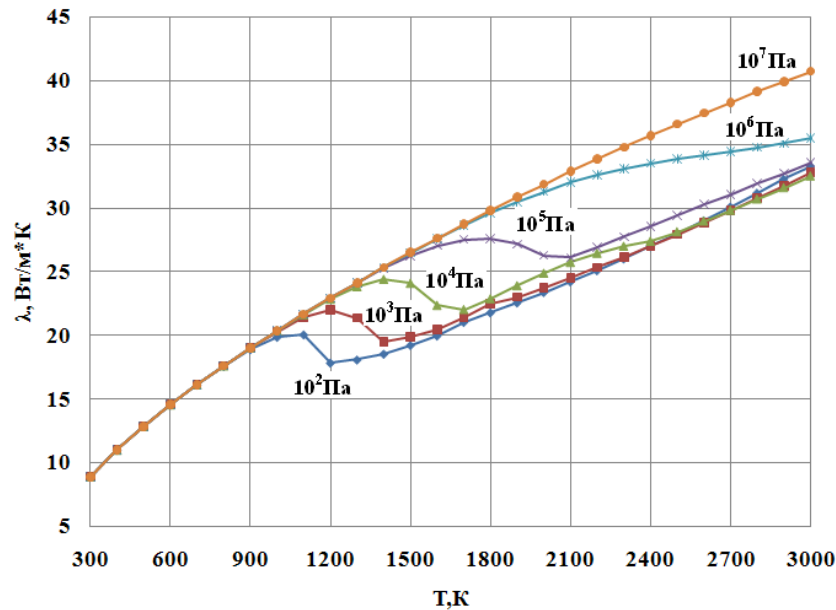


Рисунок 6 – Зависимость коэффициента теплопроводности от температуры при различных давлениях в атмосфере воздуха

В таблицах 8 и 9 представлены значения теплоемкости, теплопроводности и температуропроводности расплава от температуры в атмосфере Ar и воздуха соответственно при давлении 10^5 Па.

Температуропроводность рассчитывалась по известной формуле:

$$a = \frac{\lambda}{c_p \rho} \quad (17)$$

где λ – коэффициент теплопроводности, кВт/(м * К);

c_p – равновесная удельная теплоемкость, кДж/(кг*К);

ρ – плотность, кг/м³.

В случае нагрева расплава в атмосфере воздуха значения теплоемкости и теплопроводности практически в два раза превышают значения данных величин в инертной атмосфере. Температуропроводность в кислородосодержащей атмосфере наоборот значительно падает. Все это вызвано тем, что в процессе нагрева расплава в воздушной атмосфере образуется ряд оксидных соединений, содержание которых в системе достигает 25-30%, что вносит существенный вклад в теплофизические характеристики.

Достоверность полученных данных подтверждается апробированием на хорошо изученной системе Pb-Bi. Расхождение полученных результатов со значениями, представленными в справочнике теплофизических свойств материалов Чиркина С.В., не превышает 10-15% для теплоносителей схожего состава: Bi-Pb, Bi-Pb-Sn и Bi-Pb-Sn-Cd.

Таблица 8 – Значения теплоемкости, теплопроводности и температуропроводности расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd от температуры в атмосфере Ar при P=10⁵ Па

T, K	Cp, кДж / (кг * K)	λ, кВт/(м * K)	ρ, кг / м ³	a, 10 ⁻⁶ м ² /с
300	0.152	0.009	9720	6,09
400	0.17	0.011	9610	6,73
500	0.169	0.013	9480	8,11
600	0.17	0.015	9260	9,52
700	0.173	0.016	9140	10,11
800	0.168	0.018	9020	11,88
900	0.17	0.019	8900	12,56
1000	0.171	0.020	8770	13,34
1100	0.173	0.022	8650	14,70
1200	0.175	0.023	8510	15,44
1300	0.177	0.024	8390	16,16
1400	0.179	0.025	8270	16,89
1500	0.181	0.025	8140	16,97

Таблица 9 – Значения теплоемкости, теплопроводности и температуропроводности расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd от температуры в атмосфере воздуха при P=10⁵ Па

T, K	ρ, кг/м ³	λ, кВт/м*К	Cp, кДж/кг*К	a, 10 ⁻⁶ м ² /с
400	6830	0,022	0,297	0,95
500	6300	0,025	0,307	1,23
600	6420	0,029	0,315	1,43
700	6200	0,032	0,322	1,64
800	6183	0,035	0,322	1,83

Графически-расчетным методом определены значения энтальпии I, соответствующие фазовым переходам. Произведено моделирование с шагом 1К и взяты приближенные значения к энтальпии, полученной в графически-расчетном методе.

В области фазовых переходов температурные зависимости полной энтальпии системы $I=f(T)$ (кДж/кг), испытывают скачкообразные изменения. Это позволяет определить температуру T_{фп}, близкую к температуре фазового перехода (температуру испарения) (представленную в таблице 10) и изменение энтальпии ΔH_{фп} в области интенсивного перехода расплава в газовую фазу (таблица 11). Расчет энтальпии производился по формуле:

$$\Delta H_{фп} \approx \Delta I_{фп} / m_j \quad (18)$$

где m_j - число молей изучаемого j-го вещества в системе;

Расчет энтропии производился по формуле:

$$\Delta S_{фп} \approx \Delta H_{фп} / T_{фп} \quad (19)$$

Результаты расчета представлены в таблице 11. С уменьшением внешнего давления температура испарения растет, значения энтальпии испарения уменьшаются, а значения энтропии фазового перехода увеличиваются.

Таблица 10 – Температуры испарения компонентов расплава при различных давлениях в атмосфере Ar

P, Па	TERRA		Расчетные*
	I, кДж/кг	Тф.п., К	I, кДж/кг
10 ²	872,42	1410	877,24
10 ³	919,14	1599	920,21
10 ⁴	893,05	1819	894,03
10 ⁵	875,37	2087	876,08
10 ⁶	894,12	2569	893,99

*-рассчитано путем применения графического метода использованного в [Моисеев Г.К. Некоторые расчётные методы определения термодинамических и термохимических свойств неорганических соединений – М: Деп. в ВИНТИ 1992, №2845-В92. С. 180.]

Таблица 11 – Температуры, энтальпии и энтропии фазового перехода расплав-газ в системе Bi – Pb – Sn – Cd – Ag при давлениях 10²-10⁷ Па

P, Па	Тфп, К	ΔH _{фп} , кДж/моль	ΔS _{фп} , Дж/(моль*К)
10 ²	1410	185,14	13,13
10 ³	1599	173,42	10,84
10 ⁴	1819	161,95	8,90
10 ⁵	2087	159,17	7,63
10 ⁶	2569	154,59	6,02

Поскольку установлено, что в расплаве присутствуют металлические соединения, а они могут оказывать влияние на теплофизические свойства расплава были изучены свойства индивидуальных металлических соединений. Методом термодинамического моделирования с помощью программного комплекса TERRA проведено моделирование нагрева индивидуальных двойных и тройных интерметаллических соединений: Bi₂Sn₃, Cd₃Bi₂, Bi₇Pb₃, Bi₇Pb, Pb₃Bi₄, Pb₃Bi, CdSn, PbSn₃, Sn₃Bi, Sn₄Bi₂, SnBi, PbSn, BiPb, Pb₅Bi₄Sn₄, PbBi₂Sn₂, в атмосфере Ar с учетом возможности образования соединений и оценены константы равновесия по формуле (16). Сводные графики значений lnK для 2-х и 3-х индивидуальных интерметаллических соединений в инертной атмосфере при P=10⁵ Па. представлены на рисунке 7. Произведен расчет теплофизических свойств бинарных и тройных ИМС – пар при различных условиях. Все результаты расчетов представлены в диссертационном исследовании.

С повышением температуры интерметаллиды термически разлагаются.

В паровой фазе с повышением температуры происходит термическая диссоциация молекулярных паров. Фрагмент характеристик испарения двойных интерметаллидов для 10^5 Па представлен в таблице 12.

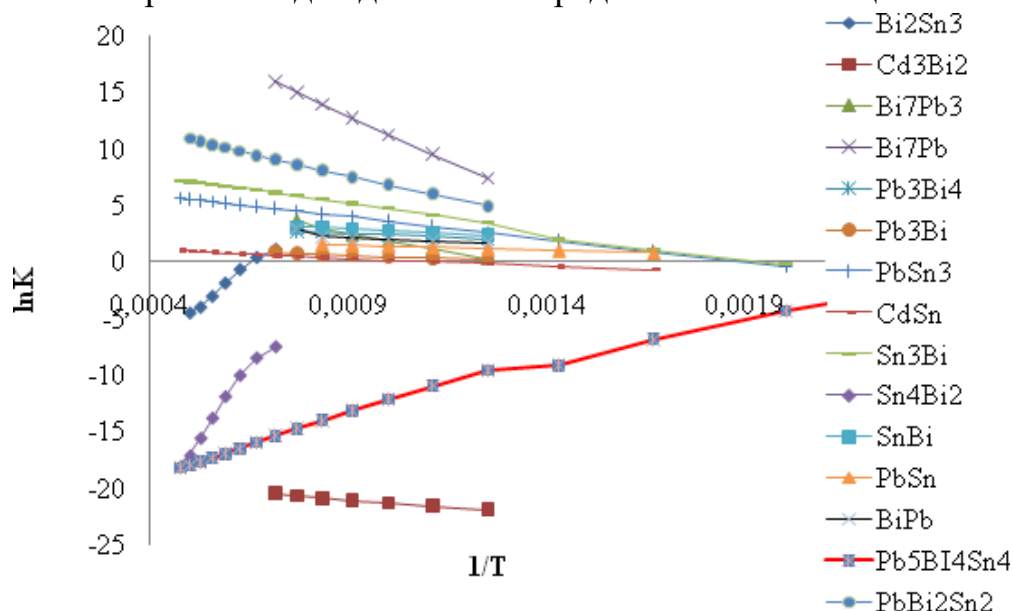


Рисунок 7 – Значения LnK для индивидуальных 2-х и 3-х ИМС в инертной атмосфере при 10^5 Па

С целью моделирования состава оксидного слоя теплоносителя при создании оксидных пленок посредством управляемого окисления для защиты оборудования от коррозионного воздействия теплоносителя и в случае возможной аварии проведена процедура моделирования окисления и испарения расплава системы 42.0масс. % Bi - 40.6масс. % Pb - 10.0масс. % Sn - 7.4масс. % Cd. Для проведения моделирования база данных программы TERRA была дополнена теплофизическими свойствами простых и сложных оксидных соединений, рассчитанных в главе 1, образование которых возможно в результате нагрева сплава в атмосфере воздуха.

Таблица 12 – Характеристики испарения 2-х индивидуальных ИМС при $P=10^5$ Па.

ИМС	$P=10^5$ Па.			
	$T_{ф.п.}, K$	$I, Дж/моль$	$\Delta H_{ф.п.}, Дж/моль$	$\Delta S_{ф.п.}, Дж/(моль \cdot K)$
BiPb	1324	2156,07	21563,63	16,28
Pb ₃ Bi	1407	2505,34	25051,51	17,86
Bi ₇ Pb ₃	1435	2800,51	28005,78	19,52
Pb ₃ Bi ₄	1404	2735,01	27349,81	19,47
Bi ₇ Pb	1425	2698,10	2698,81	19,93
Bi ₂ Sn ₃	2012	3917,13	39171,52	19,46
PbSn ₃	2002	3794,74	37957,52	19,46
Sn ₃ Bi	2015	3800,18	37996,64	18,86
Sn ₄ Bi ₂	2101	4274,23	42736,17	20,34

В таблице 13 представлены значения температур фазовых переходов в расплаве 42,0Bi-40,6Pb-10,0Sn-7,4Cd в атмосфере воздуха для различных диапазонов давлений.

Исследовано окисление индивидуальных соединений, обнаруженных в расплаве Bi-Pb-Sn-Cd: Bi_2Sn_3 , Bi_5Pb_3 , Bi_7Pb_3 , Bi_7Pb , $BiPb$, Cd_3Bi_2 , $CdSn$, Pb_3Bi , $PbBi_2Sn_2$, $PbSn$, Sn_3Bi , $SnBi$ и оценены константы равновесия реакций окисления по формуле (16).

Таблица 13- Значение энтальпии и температуры фазового перехода, полученного расчетным методом и с использованием программного комплекса TERRA для различных значений в атмосфере кислорода

P, Па	TERRA		расчетные*
	I, кДж/кг	Тф.п., К	I, кДж/кг
10^2	-4,75	1279	-5,29
10^3	26,24	1453	25,7
10^4	25,10	1701	25,4
10^5	22,34	1852	22,03

*-рассчитано путем применения графического метода использованного в [Моисеев Г.К. Некоторые расчетные методы определения термодинамических и термохимических свойств неорганических соединений. – М: Деп. в ВИНТИ 1992, №2845-B92. С. 180.]

С применением программного комплекса TERRA произведен расчет теплофизических характеристики 11 двойных и 1 тройного интерметаллического соединения при давлении от 10^2 до 10^5 Па в атмосфере воздуха.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследован состав фазовых составляющих в микроструктуре закристаллизованных образцов системы 42.0масс.% Bi - 40.6масс.% Pb - 10.0масс.% Sn - 7.4масс.% Cd подверженных нагреву до $150^{\circ}C$ и перегреву до $500^{\circ}C$. Результаты термического и микрорентгеноспектрального анализа позволяют предположить о существовании в расплаве помимо атомов Bi, Pb, Sn, Cd металлических соединений, которые могут присутствовать в нем в виде кластеров.

1. а) Исследованы термические процессы, происходящие в расплаве системы Bi-Pb-Sn-Cd (с учетом возможностей образования металлических соединений) в инертной атмосфере при различных внешних условиях в диапазоне температур 300-3000К. Впервые установлено наличие в расплаве Bi-Pb-Sn-Cd в инертной атмосфере 15 металлических соединений: Pb_3Bi , $PbSn_3$, Pb_3Bi_4 , $PbSn$, $CdSn$, Cd_3Bi_2 , Sn_3Bi , $SnBi$, $BiPb$, Bi_7Pb_3 , Bi_7Pb , Bi_2Sn_3 , Sn_4Bi_2 , $PbBi_2Sn_2$, $Pb_5Bi_4Sn_4$. Оценены их теплофизические характеристики и

проведена верификация с имеющимися в литературе экспериментальными данными. б) Исследованы термические процессы, происходящие в индивидуальных двойных и тройных интерметаллических соединений в инертной атмосфере и атмосфере воздуха с учетом возможности образования более простых соединений. В инертной атмосфере большей термической устойчивостью обладают соединения: Sn_3Bi , CdSn , PbSn_3 и $\text{Pb}_5\text{Bi}_4\text{Sn}_4$.

2. Оценены константы равновесий реакций термической диссоциации, протекающих в инертной атмосфере для расплава системы Bi-Pb-Sn-Cd и индивидуальных 2-х и тройных интерметаллических соединений.

Установлено, что для ряда соединений равновесие сдвинуто в сторону образования исходных веществ: Sn_4Bi_2 , Bi_2Sn_3 , Cd_3Bi_2 , $\text{Pb}_5\text{Bi}_4\text{Sn}_4$.

Исследовано окисление расплава системы $\text{Ar} - 42.0\text{масс. \% Bi} - 40.6\text{масс. \% Pb} - 10.0\text{масс. \% Sn} - 7.4\text{масс. \% Cd} - 23,1\text{масс. \% O}_2$ для $P=10^2-10^7\text{Па}$ с учетом возможности образования простых и сложных оксидных соединений. Оценены константы равновесия реакций. В присутствии кислорода реакции протекают более сложным образом. На процесс протекания реакций существенным образом оказывает влияние внешнее давление.

3. Рассчитаны теплофизические свойства и температуры фазовых переходов следующих систем: Bi-Pb-Sn-Cd – инертная атмосфера; Bi-Pb-Sn-Cd – окислительная атмосфера; интерметаллическое соединение – инертная атмосфера; интерметаллическое соединение – окислительная атмосфера. При низких давлениях в атмосфере воздуха наблюдается смещение температуры фазовых переходов в область более низких температур. В области более высокого давления (от 10^4 Па.) температуры фазовых переходов в атмосфере кислорода значительно превышают (на 200К) значения температур фазовых переходов в инертной атмосфере. При 10^5 Па. Наличие воздуха в системе не оказывает существенного влияния на значение температуры фазового перехода. Повышение давления ведет к смещению температуры фазового перехода в высокотемпературную область.

Впервые установлено наличие в расплаве в кислородосодержащей атмосфере:

а) в конденсированной фазе: Bi , Pb , Sn , Cd , BiPb , SnBi , PbSn , Cd_3Bi_2 , Pb_3Bi , Bi_7Pb , Bi_7Pb_3 , Bi_5Pb_3 , CdSn , Sn_3Bi , Bi_2Sn_3 , PbBi_2Sn_2 ;

б) в оксидной фазе: PbSnO_3 , SnO , PbO , BiO , SnO_2 , $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{O}_5$, $\text{Pb}_3\text{Bi}_2\text{O}_6$, Bi_4PbO_7 , Bi_2CdO_4 , CdO , CdSnO_3 , Bi_2PbO_4 , $\text{Bi}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$, Bi_4CdO , Cd_2PbO_4 , Bi_2O_3 ;

в) в паровой фазе: Pb , Bi , Cd , Bi_2 , SnO , PbO , Sn_2O_2 , O_2 , BiO , Pb_2 , O , Sn , Cd_2 , Bi_4 , Pb_2O_2 , SnO_2 , CdO , PbO_2 , Bi_3 , Sn_2 . Теплофизические свойства простых оксидов заимствованы из справочных данных, теплофизические свойства

сложных оксидных соединений рассчитаны и хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Перспективы дальнейшего развития темы: исследование перспективных жидкометаллических теплоносителей методом термодинамического моделирования с целью определения теплофизических свойств необходимых для проведения инженерных расчетов.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

*Публикации в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК и
Аттестационным советом УрФУ*

1. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Расчет термодинамических свойств интерметаллидов системы Bi-Pb-Sn-Cd / **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев, Н.М.Барбин // Расплавы. – 2011. – № 5. – С. 83-91 (0,45 п.л./ 0,10 п.л.).

2. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Термический и микрорентгеноспектральный анализ сплава системы Pb-Bi-Cd-Sn / **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, М.В.Ильиных, В.М.Замятин, Н.М.Барбин // Расплавы. – 2012. – №1. – С. 67-72 (0,30 п.л./ 0,06 п.л.).

3. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Термическое моделирование термических процессов, происходящих в расплавленном сплаве Вуда при различных давлениях / Н.М. Барбин, **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, Д.И.Терентьев, С.Г. Алексеев // Прикладная физика. – 2014. – №3. – С. 8-11; 0,20 п.л./ 0,05 п.л. (Scopus).

4. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование паровой фазы при испарении расплавленного сплава Вуда при различных давлениях / Н.М. Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г. Алексеев // Прикладная физика. – 2014. – №3 – С. 12 – 16, (0,25 п.л./ 0,06 п.л.) (Scopus).

5. **Тикина И.В.** Use of the miedema's model to predict the standard enthalpy of formation of the intermetallic cadmium – tin nanoparticle / N.Barbin, S. Alexeev, **I.Ovchinnikova (I.Tikina)** // Nanoscale – Arranged Systems for Nanotechnology. – 2015. – PP. 103-105; 0,15 п.л./ 0,05 п.л. (Scopus).

6. **Тикина И.В.** Определение теплофизических свойств сплава 45% Pb – 55% Bi. Термодинамическое моделирование / Н.М.Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев, М.Ю.Порхачев // Теплофизика высоких температур. – 2017. – Т. 55. – №4. – С. 506-509; 0,20 п.л./ 0,04 п.л. (Scopus, Web of Science).

7. **Tikina I.V.** Changes in the composition of the condensed and vapor phase when heating the wood alloy / N.M.Barbin, **I.V Tikina**, D.I.Terent'ev and

S.G.Alekseev // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 1134 (2018) 012006 doi: 10/1088/1742-6596/1134/1/012006; 0,23 п.л./ 0,06 п.л. (Scopus).

Другие публикации:

8. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Термические свойства двойных интерметаллидов в системе Pb-Bi: научное издание / **И.В.Овчинникова (И.В. Тикина)**, Д.И.Терентьев, С.Г. Алексеев, Н.М. Барбин // Теплофизические экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в обоснование характеристик и безопасности ядерных реакторов на быстрых нейтронах (Теплофизика-2011): труды – Обнинск: Изд-во ГНЦ РФ-ФЭИ, 2011. – С. 81-82 (0,1 п.л./ 0,03 п.л.).

9. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Стандартная энтальпия образования двойных интерметаллидов в системе Sn-Bi / **И.В. Овчинникова (И.В. Тикина.)**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев, Н.М. Барбин // Актуальные проблемы физики твердого тела: сборник докладов Международной научной конференции. – Минск: А.Н. Вараксин, 2011. – Т.3. – С. 69-71 (0,15 п.л./ 0,04 п.л.).

10. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Испарение сплава системы Bi-Pb-Sn-Cd в инертной атмосфере / В.А.Сысоев, **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)** // Пожарная безопасность: проблемы и перспективы: материалы II Всероссийской научно-практической конференции с международным участием. Часть 1. Воронеж: ВИ ГПС МЧС России, 2011. – С. 299-301 (0,15 п.л./ 0,08 п.л.).

11. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Стандартная энтальпия образования двойных интерметаллидов в системе Pb-Bi / **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев, Н.М.Барбин // Физические свойства металлов и сплавов: труды VI Всероссийской научно-технической конференции. СПб.: УрФУ, 2011. – С. 37 (0,05 п.л./ 0,01 п.л.).

12. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Особенности микроструктуры сплава системы Pb-Bi-Cd-Sn / **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, М.В.Ильиных, В.М.Замятин, Н.М.Барбин. // СММТ'2011: труды международной научно-технической конференции. – СПб.: Изд-во Политех. Ун-та., 2011. – С. 382-383 (0,10 п.л./ 0,03 п.л.).

13. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.).** Расчетное определение теплоемкостей интерметаллидов образующихся в системе Bi-Cd-Sn-Pb / **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, Д.И.Терентьев, Н.М. Барбин // XIII Российская

конференция по теплофизическим свойствам веществ (с международным участием). – Новосибирск, 2011. – С. 125-126 (0,20 п.л./ 0,03 п.л.).

14. **Ovchinnikova Irina (Tikina Irina)**. Use of the miedema's model to predict the standard enthalpy of formation of the intermetallic cadmium-tin nanoparticle / Nicolay Barbin, Sergey Alexeey and **Irina Ovchinnikova (Irina Tikina)** // Smart nanocomposites. – 2013. – V. 4, № 1. – P. 43-45 (0,15 п.л./ 0,05 п.л.).

15. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.)**. Стандартная энтальпия образования двойных интерметаллидов в системе Pb-Sn / Н.М.Барбин, **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев // Актуальные проблемы физики твердого тела: сборник докладов Международной научной конференции. Минск, 2013. – Т. 3. – С. 380-381 (0,10 п.л./ 0,03 п.л.).

16. **Овчинникова И.В. (Тикина И.В.)**. Стандартная энтальпия образования интерметаллида $Pb_2Bi_7Sn_4$ / Н.М.Барбин, **И.В. Овчинникова (И.В.Тикина)**, С.Г. Алексеев // Фазовые переходы, межфазные границы и нанотехнологии. – 2014. – №3. – С. 9-10 (0,10 п.л./ 0,03 п.л.).

17. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование паровой фазы при испарении расплавленного сплава Вуда при 0,1 атм. / Н.М.Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев // Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы: труды IV международного междисциплинарного симпозиума. Нальчик – Ростов-на-Дону – Грозный-пос.Южный: Фонд науки и образования, 2014. – Выпуск IV. – С. 24-25 (0,10 п.л./ 0,03 п.л.).

18. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование термических процессов, происходящих в расплавленном сплаве Вуда / Н.М.Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев. // Нанотехнологии функциональных материалов: труды международной научно-технической конференции. СПб.: Изд-во. Политехн. ун-т, 2014. – С.414-415 (0,10 п.л./ 0,03 п.л.).

19. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование термических процессов, происходящих в системе расплавленный сплав Вуда- пар / Н.М.Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г. Алексеев // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы. 2014. – Вып. 1. – С. 64-68 (0,25 п.л./ 0,06 п.л.).

20. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование паровой фазы при испарении расплавленного сплава Вуда / Н.М.Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г. Алексеев // Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества: сборник материалов V Международной конференция

с элементами научной школы для молодежи. Суздаль. ИМЕТ РАН, 2014. – С. 400-402 (0,15 п.л./ 0,04 п.л.).

21. **Тикина И.В.** Определение теплоемкости сплава Pb-Vi. Компьютерный эксперимент / Н.М.Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев // Современные методы и средства исследований теплофизических свойств веществ: материалы III международной научно-технической конференции. СПб.: Университет ИТМО, 2015. – С. 67-68 (0,10 п.л./ 0,03 п.л.).

22. **Тикина И.В.** Состав паровой фазы при испарении сплава Вуда при повышенном давлении / **И.В.Тикина**, Н.М.Барбин, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев // Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы: труды V международного междисциплинарного симпозиума. Нальчик – Ростов-на-Дону – Грозный – пос. Южный: Российский фонд фундаментальных исследований, 2015. – Вып. V. – С. 40-43 (0,20 п.л./ 0,05 п.л.).

23. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование системы расплавленный сплав (Vi+Pb+Sn+Cd) – пар при 0,1 атм. / Н.М.Барбин, **И.В.Тикина**, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев // Современные металлические материалы и технологии: сборник трудов XI международной научно-технической конференции. СПб.: Изд-во Политех. ун-та., 2015. – С. 1264-1271 (0,40 п.л./ 0,10 п.л.).

24. **Тикина И.В.** Состав паровой фазы при испарении сплава Вуда при пониженном давлении / **И.В.Тикина**, Н.М.Барбин, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев // Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы: труды VI международного междисциплинарного симпозиума. Нальчик – Ростов-на-Дону – пос. Южный: Российский фонд фундаментальных исследований, 2016. – Вып. VI. – С. 53-56 (0,20 п.л./ 0,05 п.л.).

25. **Тикина И.В.** Поведение давления паров сплава системы Pb(45)-Vi(55) в результате нагрева до 2000 К при атмосферном давлении / **И.В.Тикина**, Д.И. Терентьев Н.М.Барбин, С.Г.Алексеев // Техносферная безопасность. Екатеринбург: УрИ ГПС МЧС России, 2016. – №1 (10). – С. 2-6 (0,25 п.л./ 0,06 п.л.).

26. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование нагрева сплава Вуда / **И.В.Тикина**, Н.М.Барбин, Д.И.Терентьев, С.Г.Алексеев // Компьютерное моделирование физико-химических свойств стекол и расплавов: труды XIII Российского семинара. Министерство образования и науки РФ. Курган: Курганский государственный университет, 2016. – С. 24-26 (0,15 п.л./ 0,04 п.л.).

27. **Тикина И.В.** Расчет термодинамических свойств сложных оксидов для прогнозирования процессов горения / **И.В.Тикина**, С.В.Попова, Н.М.Барбин // Актуальные проблемы обеспечения безопасности в Российской Федерации: сборник материалов Дней науки. Екатеринбург: Уральский институт ГПС МЧС России, 2016. – Часть 2. – С. 123-128 (0,3 п.л./ 0,1 п.л.).

28. **Tikina Irina.** Thermodynamic modeling of thermal dissociation of the intermetallic compounds $PbBi_2Sn_2$ / **Irina Tikina**, Nicholas Barbin. // Ab initio based modeling of advanced materials AMM-2016: satellite Conference of XX Mendeleev Congress on general and applied chemistry. Ekaterinburg, 2016. – P. 63 (0,05 п.л./ 0,03 п.л.).

29. **Тикина И.В.** Состав паровой фазы при испарении сплава Вуда при пониженном давлении / **И.В.Тикина**, Н.М.Барбин, Д.И.Герентьев, С.Г.Алексеев // Фазовые переходы, межфазные границы и нанотехнологии. – 2017. – №4. – С. 63-66 (0,20 п.л./ 0,05 п.л.).

30. **Тикина И.В.** Термодинамическое моделирование паровой фазы при испарении расплавленного сплава системы Pb-Bi-Cd-Sn при различных давлениях / Н.М.Барбин, **И.В. Тикина** // СММТ'2017: труды международной научно-технической конференции. – СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2017. – С. 85-88 (0,2 п.л./ 0,1 п.л.).

31. **Тикина И.В.** Термодинамическое поведение системы Bi-Pb-Sn-Cd при нагреве / Н.М. Барбин, **И.В. Тикина** // Компьютерное моделирование физико-химических свойств стекол и расплавов: труды XIV Российского семинара – Курган: Изд-во Курганского ун-та, 2018. – С. 21-23 (0,15 п.л./ 0,08 п.л.).