

О Г Л А В Л Е Н И Е

ВВЕДЕНИЕ.....	3
1. РЕЗОНАНСНЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВЯЗИ.....	7
1.1. Потенциалы взаимодействия атомов.....	8
1.2. Пространственное взаимодействие в двухатомных и кластерных структурах.....	13
1.3. Дискретная, резонансная природа межатомных связей.....	15
1.4. Сравнение моделей и следствия.....	20
2. ДИСКРЕТНАЯ МОДЕЛЬ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ.....	22
2.1. Комплексная потенциальная функция взаимодействия.....	23
2.2. Дальний и ближний порядок связи.....	24
2.3. Физические модели конденсации пара.....	26
2.4. Определение потенциалов и схемы уровней атома меди.....	30
2.5. Схема уровней связанных атомов углерода.....	33
2.6. Элементарные кристаллографические замечания.....	35
2.7. Конфигурации и энергетика кластеров. Схемы конденсации и релаксации.....	39
Выводы.....	42
3. СТАТИСТИКА СВЯЗАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА.....	45
3.1. Статистика дискретных состояний кластерных частиц.....	45
3.2. Энергетика положений атомов в связанном состоянии.....	50
3.3. Формирование и перестройка распределений. Теплоота переходов.....	52
3.4. Энергия связей и энергия тепловых колебаний молекул.....	55
4. ДОПОЛНЕНИЯ К ТЕОРИИ ЖИДКОСТЕЙ.....	58
4.1. Статистика молекул жидкости.....	58
4.2. Поверхностное натяжение и объемные напряженные состояния в конденсированных частицах.....	59
4.3. Статистика поверхностного слоя.....	62
4.4. Энергетика положений на поверхности и в объеме жидкости.....	65
4.5. Теорема о росте малого сферического кластера.....	67
4.6. Теорема о внешнем давлении.....	68
4.7. Уточненное определение поверхностного натяжения.....	70
4.8. КПН для малых связанных частиц.....	73
4.9. Внутренние и внешние переходы, испарение.....	74
4.10. Отдельное заключение по применению теории нуклеации.....	76
Выводы.....	78
5. КИНЕТИКА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ.....	79
5.1. Принципы построения кинетической модели.....	80
5.2. Условия ассоциации и отрыва атомов.....	81
5.3. Система обозначений разрешенных энергетических состояний.....	84
5.4. Реакция образования и распада димеров.....	86
5.5. Пороговые значения реакций.....	89
5.6. Реакции роста кластеров.....	90

5.7. Температура конденсирующихся частиц.....	91
5.8. Кинетические формулы для малых кластеров.....	94
6. КОНДЕНСАЦИЯ УГЛЕРОДНОГО ПАРА.....	100
6.1. Особенности моделирования аэрозольных смесей.....	100
6.2. Кинетические модели конденсации углеродного пара.....	102
6.3. Сборка димеров и малых кластеров.....	104
6.4. Механизмы роста дисперсных частиц сажи и фуллеренов.....	105
6.5. Релаксация структур, столкновения углеродного пара.....	111
6.6. Диффузионная модель расширения углеродного пара.....	112
6.7. Система кинетических уравнений объемной конденсации углерода.....	114
6.8. Геометрическое моделирование роста фуллеренового зародыша.....	117
Выводы.....	120
7. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И РАВНОВЕСИЯ ВОДЫ.....	121
7.1. Свойства воды в термных дискретной модели.....	121
7.2. Особенности фазовых состояний воды.....	122
7.3. Смесь азота и паров воды. Кинетическая модель.....	125
7.4. Переопределение влажности воздуха. Кластеры воды в атмосфере.....	127
7.5. Распределение растущих кластеров по размерам в соплах и струях.....	132
7.6. Эффекты переходов вода – лед и пар – лед.....	136
Выводы.....	138
8. ТЕХНИЧЕСКИЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ.....	139
8.1. Механическая деинтеграция и активация вещества.....	139
8.2. Закалка металлов, отпуск, структурная релаксация.....	141
8.3. Термоакустическая обработка.....	143
8.4. Смежные области применения в материаловедении.....	144
8.5. Эффект Кухара.....	145
8.6. Результаты экспериментов по конденсации паров и плазмы металлов.....	151
Выводы.....	154
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	154
Библиографический список.....	157

Иголкин Сергей Иванович

Резонансные связи и дискретная модель конденсированного вещества

Компьютерная верстка: *С.В. Кашуба*

Подписано в печать 27.12.2021. Формат 60×84/16. Бумага документарная.

Печать цифровая. Усл. печ. л. 9,6. Тираж 300 экз. Заказ № 158.

Балтийский государственный технический университет

Типография БГУ

190005, Санкт-Петербург, 1-я Красноармейск



БИБЛИОТЕКА БГУ "ВОЕНМЕХ"