

На правах рукописи

ЗИХОВА КАРИНА ВИЛИКОВНА

**ДВУХПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ИЗОТЕРМЫ
ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нальчик-2018

Работа выполнена на кафедре теоретической и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» (г. Нальчик).

Научный руководитель: **Калажоков Хамидби Хажисмелович**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» (г. Нальчик).

Официальные оппоненты: **Саввин Владимир Соломонович**, доктор физико-математических наук, профессор Обнинского института атомной энергетики – филиал ФГАОУ ВПО «Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ» (г. Обнинск, Студенческий городок 1)
Дохов Магомед Пашевич, Доктор технических наук, профессор ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет им. В.М. Кокова», академик Адыгской Международной академии наук (г. Нальчик).

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет» (г. Грозный).

Защита состоится «05» декабря 2018 года в 16:00 на заседании диссертационного совета Д 212.076.02 в ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» по адресу: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173, зал заседаний диссертационного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Кабардино-Балкарского государственного университета им. Х.М. Бербекова» www.kbsu.ru

Автореферат разослан « » октября 2018 г.

И. о. ученого секретаря диссертационного совет Д 212.076.02

д.ф.-м.н., профессор

Ахкубеков А.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Со второй половины XX века значительное внимание уделяется исследованиям в области физики, химии и механики поверхности твердых и жидких металлов и сплавов. Актуальность таких исследований обусловлена тем, что сведения о процессах, происходящих на межфазных границах, необходимы для развития как существующих теорий физики конденсированного состояния, так и научных основ новых технологических процессов, связанных с созданием современных конструкционных материалов и тонкопленочных систем современной электроники. Представляет особый интерес изучение влияния на поверхностные свойства металлических сплавов тончайших поверхностных слоев, которые образуются в результате адсорбционных и сегрегационных эффектов, влияния их на поверхностные свойства сплавов как поверхностное натяжение (ПН, σ), работа выхода электрона (РВЭ, ϕ), износостойкость, коррозионная стойкость и т.д.

К настоящему времени разработаны уникальные приборы и методики для изучения поверхностных свойств твердых тел. К сожалению, они не всегда могут быть использованы для изучения свойств материалов в жидком состоянии. Задача еще сильнее осложняется при изучении химически активных и легколетучих материалов как щелочные металлы и их сплавы, сплавы на основе других металлов с участием щелочных. Поэтому для решения задач, связанных с поверхностью часто приходится возвращаться к традиционным методам определения поверхностных свойств, например к измерению ПН и через него определить другие свойства расплава как состав поверхностного слоя, адсорбции компонентов, молярная поверхность, толщина поверхностного слоя, активности компонентов в поверхностном слое и др. Измерение ПН и построение экспериментальной изотермы ПН (или $\sigma(x)$) для бинарной металлической системы стало основой методов определения перечисленных выше термодинамических свойств поверхности расплава. Однако, построение экспериментальной изотермы ПН требует много времени и средств. Для вычисления перечисленных выше свойств поверхности необходимо иметь достаточно точное значение частной производной $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ от кривой изотермы $\sigma(x)$, что в настоящее время определяется графическим способом недопустимо грубо. При этом малейшая неточность в определении $\sigma(x)$ будет вносить значительную ошибку в величину производной $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$, а последняя, в свою очередь - в вычисляемые через $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ параметры поверхности. Использование метода малых парабол для более точного определения величины $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ оставляет наши расчеты в рамках приближения идеальных растворов. Есть другой подход для решения этой задачи – составление надежного уравнения изотермы ПН. К сожалению, существующие уравнения изотермы ПН позволяют описать экспериментальные изотермы с достаточной точностью, если рассматриваемая бинарная система близка по свойствам к

идеальным или регулярным растворам. Наличие достаточно точной аналитической изотермы ПН, то есть, функции $\sigma(x)$, упростило бы существенно расчеты и уменьшило бы ошибки при вычислениях многих параметров поверхности расплава. В связи с изложенным становится очевидной актуальность составления надежного уравнения изотермы ПН и усовершенствования на его основе традиционных методик получения первичной информации о поверхности и развития методов расчетов поверхностных характеристик бинарных и многокомпонентных металлических расплавов.

Степень разработанности темы диссертации. В настоящее время измерены изотермы ПН многих бинарных и трехкомпонентных сплавов систем щелочных и р-металлов. Обработка результатов этих данных с целью извлечения других информации о поверхности из данных экспериментов по измерению ПН проводится на основе метода Гиббса и метода слоя конечной толщины [Гиббс, Гутгенгейм, Русанов]. При этом во многие расчеты входят значения частных производных изотерм ПН $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$, которые определяются часто графически. Такая методика определения $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$, как отмечено выше, допускает значительные относительные ошибки-до 15% и более, а расчеты других параметров на основе найденных $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ проводятся чаще в приближении идеальных и реже в приближении регулярных растворов. К настоящему времени предложены уравнения для описания экспериментальных изотерм ПН, которые могут быть использованы для расчетов $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$. Однако из-за недостаточно точного определения многих параметров, входящих в эти уравнения, например, x_i^{ω} , f_i^{ω} , a_i , a_i^{ω} , V_i^{ω} и др., они становятся непригодными для практического их использования. В связи с этим проблемы получения более точного уравнения изотермы ПН, и развития методик расчетов поверхностных характеристик расплавов являются актуальными.

Цель работы. Провести анализ экспериментальных изотерм ПН, которые появились в литературе после выхода на свет монографии С.И.Попеля (1994г) и на основе результатов такого анализа, а также полученных ранее данных по изучению концентрационной зависимости ПН, вывести уравнение изотермы ПН для бинарных металлических систем. С использованием полученного уравнения усовершенствовать методики расчетов поверхностных характеристик металлических расплавов.

Для реализации поставленной цели решены следующие задачи:

1. Рассмотреть основные типы экспериментальных изотерм ПН бинарных металлических систем и установить наиболее общие закономерности изменения ПН расплава в зависимости от его состава;
2. Вывод двухпараметрического уравнения изотермы ПН бинарных металлических систем. Разработка методики определения параметров β и F уравнения изотермы ПН;

3. Аналитическое описание экспериментальных изотерм ПН бинарных систем и изотерм ПН заданного направления лучевого разреза треугольника составов тройных металлических систем;
4. Расчет адсорбций и поверхностных концентраций компонентов бинарных и тройных металлических систем, с использованием полученного уравнения изотермы ПН;
5. Расчет предельной поверхностной активности компонента расплава по Ребиндеру с использованием предложенного уравнения изотермы ПН;
6. Разработка методики прогнозирования поверхностных свойств расплавов бинарных и тройных металлических систем.

Научная новизна полученных результатов:

1. Получено двухпараметрическое уравнение изотермы ПН бинарных металлических систем, удобное для практического применения и позволяющее описать экспериментальные изотермы ПН с высокой точностью во всей концентрационной области. Разработана методика определения параметров уравнения изотермы ПН β_i и F_i ($i=2$) бинарных систем;
2. Показано что параметры β_i и F_i уравнения изотермы ПН бинарной системы имеют определенный физический смысл и играют определяющую роль при изменении ПН расплава в зависимости от его состава: β_i – изменение ПН, соответствующее избыточной концентрации i -го компонента на поверхности расплава, F_i – константа распределения частиц i -го сорта между поверхностным слоем расплава и его объемом;
3. Предложено двухпараметрическое уравнение изотермы ПН для выбранного лучевого разреза треугольника состава трехкомпонентной системы и разработана методика определения параметров уравнения β_i и F_i ($i=3$);
4. Получены аналитические выражения для расчетов поверхностных составов x_i^o компонентов бинарных и трехкомпонентных расплавов, позволяющие проводить расчеты без привлечения методики графического дифференцирования кривой изотермы ПН;
5. Впервые показано, что адсорбция добавляемого компонента зависит не только от разности ПН компонентов расплава, но и от произведения $\beta \times (F - 1)$. Причем, чем больше абсолютная величина $\beta \times (F - 1)$, тем больше адсорбция второго компонента бинарной системы $A-B$;
6. Разработаны методики прогнозирования поверхностных свойств расплавов двухкомпонентных и выбранного направления разреза треугольника составов тройных систем.

Теоретическая и практическая значимость полученных результатов:

Результаты анализов теоретических и экспериментальных изотерм ПН, следующие из них теоретические положения, на основе которых получены уравнения изотерм ПН бинарных и тройных систем, новые идеи и гипотезы, на базе которых получены расчетные формулы для расчетов адсорбций и поверхностных концентраций компонентов расплавов могут быть использованы для развития теории поверхностных явлений расплавов, а также

в учебном процессе при преподавании соответствующих спецкурсов на старших курсах физических и химических факультетов университетов.

Предложенные уравнения изотерм ПН двух и трехкомпонентных систем могут быть использованы для построения изотерм ПН с использованием экспериментальных данных по ПН всего-лишь двух расплавов произвольных составов. Полученные выражения для расчетов адсорбции и поверхностных концентрации компонентов расплавов позволяют вычислить перечисленные параметры поверхности расплава с высокой точностью. Предложенная методика прогнозирования поверхностных свойств расплавов трехкомпонентных систем может быть успешно использована для решения соответствующих задач. Данная методика дает значительный экономический эффект – в десятки раз облегчает процесс получения конечных результатов по определению поверхностных характеристик расплавов, позволяет значительно уменьшить время, затрачиваемое на проведение экспериментов, повышает точность получаемых результатов.

Методология и методы исследования. Анализ литературных данных по изучению изотерм ПН, выявление общих закономерностей в рассматриваемых проблемах, вывод основного уравнения изотермы ПН, разработка методики определения параметров уравнения изотермы ПН, теоретический анализ полученного выражения и вывод уравнений изотерм адсорбции и поверхностных концентраций компонентов расплава, расчет с использованием полученных выражений параметров поверхности расплава и сравнение их с данными экспериментов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Анализ экспериментальных изотерм ПН появившихся за последние 25 лет подтверждает справедливость выводов, сделанных Трифоновым Н.А., Попелем С.И., Еременко, Ватолиным Н.А. и др. и показывает, что имеющиеся в литературе изотермы ПН можно разделить на две большие группы:
 - а) системы с монотонным изменением ПН (из известных их более половины);
 - б) системы со сложными изотермами ПН, где наблюдаются резкие изломы на изотермах ПН, максимумы, минимумы, точки (перегиба) или изменения кривизны и т.д. Причинами таких изменений ПН являются появление в системе продуктов преимущественных взаимодействий компонентов как молекулы типа A_mB_n , кластеры, группировки атомов и т.п.;
2. Предложенные уравнения изотерм ПН бинарных и трехкомпонентных металлических систем и методики определения их параметров β_i и F_i ;
3. Полученные новые формулы, соотношения и основанные на них методики расчетов поверхностных составов компонентов двухкомпонентных и трехкомпонентных сплавов;
4. Методики построения изотерм ПН бинарных и трехкомпонентных металлических систем с использованием экспериментальных данных всего лишь двух пробных расплавов произвольных составов;
5. Полученные результаты по изотермам ПН, адсорбции и поверхностным составам бинарных и трехкомпонентных систем;

6. Разработанные методики прогнозирования поверхностных свойств расплавов двухкомпонентных и выбранного направления разреза треугольника составов трехкомпонентных систем.

Степень достоверности результатов подтверждается согласованностью предлагаемых теоретических выкладок существующим теоретическим положениям и удовлетворительным согласием результатов расчетов с результатами известных экспериментов.

Личный вклад автора. Цель и задачи диссертационной работы сформулированы научным руководителем Калажоковым Х.Х. Все выносимые на защиту результаты и положения диссертации получены и разработаны автором лично, либо при ее непосредственном участии. Вывод основных уравнений, расчеты поверхностных параметров расплавов и их обсуждения выполнены совместно с докторантом кафедры физики наносистем КБГУ Калажоковым З.Х.

Апробация результатов. Основные результаты и положения диссертации были представлены на конференциях:

- Второй международный междисциплинарный симпозиум «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» LOW Dimensional System (LDS-2). г. Ростов-на-Дону – п. Лоо, 3-8 сентября 2010 год;

- XIII Российская конференция по теплофизическим свойствам веществ (с международным участием): Тезисы докладов, Новосибирск, 28 июня – 1 июля 2011г.;

- Первый международный междисциплинарный симпозиум «Физика межфазных границ и фазовые переходы», г. Нальчик – п. Лоо, 18-23 сен., 2012;

- 18-й Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах», ОМА-18, Ростов-на-Дону-пос. Южный (п. «Южный»), 10-15 сентября 2015г.;

- Всероссийская научно-практическая конференция «Актуальные проблемы современного материаловедения». ЧГУ, г. Грозный, 2015.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 18 работ, 7 из них – в журналах, рекомендуемых ВАК РФ.

Объем и структура диссертации Диссертационная работа изложена на 126 страницах машинописного текста, содержит 71 рисунок и 16 таблиц, состоит из введения, четырех глав, выводов и списка литературы из 143 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дается обоснование актуальности темы исследования, формулируются цель и задачи диссертационной работы, отмечается научная новизна, приводятся положения, выносимые на защиту и практическая значимость полученных в работе результатов.

В первой главе приводится обзор работ по теме диссертации и наиболее важные результаты ряда авторов по изучению изотерм ПН бинарных систем, имеющие существенные значения для разрабатываемой темы. Здесь приведены типичные экспериментальные изотермы ПН бинарных и тройных систем с участием щелочных и *p*-металлов, рассмотрены теоретические уравнения изотерм ПН бинарных и многокомпонентных металлических систем.

Следует отметить, что большой рывок сделан в изучении поверхностных свойств бинарных сплавов. В настоящее время изучены и построены изотермы ПН около 180 бинарных систем, предложено несколько десятков уравнений для аналитического описания изотерм ПН, что говорит об актуальности данной задачи. Имеются уравнения изотермы ПН (Прилижаева-Дефай, Семенченко В.К., Батлера, Шишковского., Жуховицкого А.А, Гуггенгейма, Попеля-Павлова, Задумкина-Хоконова и др.), которые позволяют удовлетворительно описать экспериментальные изотермы ПН, близкие по своим свойствам к идеальным или к регулярным растворам. До сих пор нет удобного в практическом применении уравнения изотермы ПН, позволяющего описать экспериментальные изотермы ПН бинарных систем, далеких по свойствам от идеальных. В связи с этим систематизация имеющихся в литературе изотерм ПН и поиски в этом направлении для достижения поставленной цели считаются достаточно актуальными и полезными.

Анализ экспериментальных изотерм ПН показал, что имеющиеся в литературе экспериментальные изотермы ПН можно разделить на две большие группы: 1 – изотермы ПН с монотонным изменением ПН и 2 – изотермы ПН с особенностями (с максимумами, минимумами, с изменением знака кривизны и т.д.).

Глава заканчивается постановкой цели диссертационной работы и вытекающих из нее конкретных задач.

Во второй главе приводится вывод двухпараметрического уравнения изотермы ПН бинарных металлических систем, который основан на рассмотрении наиболее общей и типичной формы изотермы ПН с монотонным изменением ПН (рис.1, кривая 2).

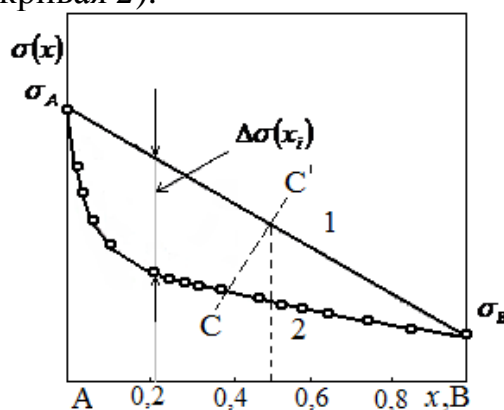


Рисунок 1 – К выводу уравнения изотермы ПН бинарной системы $A-B$: 1 – аддитивная прямая $\sigma_{ad}(x)$; 2 – экспериментальная кривая $\sigma(x)$; $\Delta\sigma(x_i)$ – отклонение ПН реальной системы (экспериментальной) от аддитивной.

При этом рассматривается отклонение экспериментальной изотермы ПН (кривой 2, $\sigma(x)$) от аддитивной [1]. Из рис.1 видно, что

$$\Delta\sigma(x_i) = \sigma(x_i) - \sigma_{ad}(x_i), \quad (1)$$

где

$$\sigma_{ad} = \sigma_A(1-x_i) + \sigma_B \cdot x_i. \quad (2)$$

Здесь x_i – концентрация расплава произвольного состава.

Причиной такой разницы (1) является адсорбционная релаксация свежееобразованной поверхности бинарного расплава со своим объемом, то есть, процесс самопроизвольного перераспределения частиц системы между поверхностным слоем и объемом расплава при установлении равновесия в системе. При этом можем записать условие равновесия химпотенциалов компонента i в поверхностном и объемном фазах расплава

$$\mu_i^{\omega} = \mu_i. \quad (3)$$

Из (3) было получено (Семенченко В.К. в 1932 г.) для избыточной концентрации второго компонента B бинарной системы $A-B$ выражение

$$x^{\omega} - x = \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x}. \quad (4)$$

В настоящей работе предложено, что изменение ПН расплава при его переходе в равновесное состояние равно

$$\Delta\sigma(x) = \beta \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x}, \quad (5)$$

где β – коэффициент пропорциональности и не зависит от состава раствора.

Тогда из (1), (2) и (5) следует

$$\sigma(x) = \beta_2 \frac{(F_2-1)(1-x)x}{1+(F_2-1)x} + \sigma_A(1-x) + \sigma_B x, \quad (6)$$

где F_2 – константа распределения частиц i –го сорта между поверхностным слоем расплава с его объемом, β_2 – параметр уравнения (6), показывающий изменение ПН соответствующее избыточной концентрации i –го компонента в поверхностном слое расплава, σ_A и σ_B – ПН чистых компонентов A и B бинарной системы $A-B$, x – молярные доли второго компонента бинарной системы $A-B$. Индекс «2» при β и F означает, что параметры β_2 и F_2 соответствуют двухкомпонентным системам.

Предложена методика для определения параметров β_2 и F_2 . Для этого готовят два сплава (1 и 2) произвольных составов x_1 и x_2 . Измерив в эксперименте значения $\sigma(x_1)$ и $\sigma(x_2)$, а затем, составляя для них уравнение (6) и, разрешив полученную систему уравнений относительно β_2 и F_2 , получим:

$$\beta_2 = \frac{\Delta\sigma(x_1) \cdot \Delta\sigma(x_2)(x_2 - x_1)}{\Delta\sigma(x_1)f(x_2) - \Delta\sigma(x_2)f(x_1)}; \quad (7)$$

$$F_2 = 1 + \frac{\Delta\sigma_1(x_1)}{\beta_3 f(x_1) - \Delta\sigma(x_1)x_1} = 1 + \frac{\Delta\sigma(x_2)}{\beta_3 f(x_2) - \Delta\sigma(x_2)x_2}, \quad (8)$$

где введены обозначения:

$$\Delta\sigma(x_1) = \sigma(x_1) - \sigma_A(1-x_1) - \sigma_B x_1; \quad (9)$$

$$\Delta\sigma(x_2) = \sigma(x_2) - \sigma_A(1-x_2) - \sigma_B x_2; \quad (10)$$

$$f(x_1) = (1-x_1)x_1; \quad (11)$$

$$f(x_2) = (1-x_2)x_2. \quad (12)$$

Формулы (9) и (10) выражают отклонения экспериментальных значений ПН расплавов от их аддитивных значений при соответствующих составах расплавов, например, x_1 или x_2 .

В качестве примера применения уравнения (6) для описания экспериментальных изотерм ПН на рис.2 приведены экспериментальные (точки) и расчетные (сплошные линии) изотермы ПН бинарных систем $Na-K$; $Na-Rb$ и $Na-Cs$, из которых видно, что результаты наших расчетов согласуются с данными эксперимента вполне удовлетворительно.

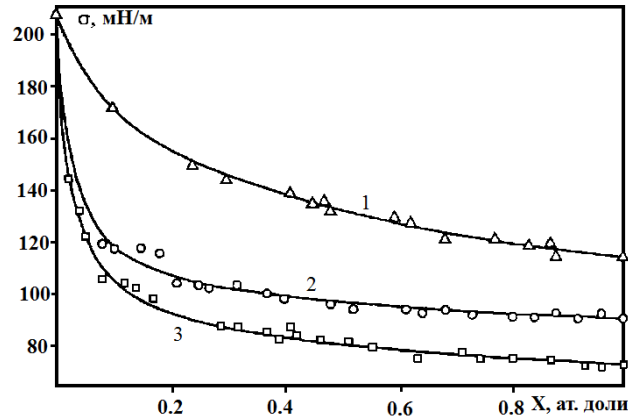


Рисунок 2 – Концентрационная зависимость ПН некоторых бинарных систем щелочных металлов $Na-K$; $Na-Rb$ и $Na-Cs$, рассчитанные по формуле (6) (сплошные линии). Точки – эксперимент: 1 – $Na-K$; 2 – $Na-Rb$ и 3 – $Na-Cs$.

Показано, что формулу (6) можно использовать и для описания изотерм ПН трехкомпонентных систем $A-B-C$ выбранного сечения, например, $c-C$ (см.рис. 7). Для этого достаточно в (6) величину σ_A заменить ПН исходного бинарного расплава – σ_{AB} , которое используется для приготовления тройных сплавов выбранного сечения, а σ_B – значением ПН добавляемого компонента C . Параметры F_2 и β_2 заменяются соответствующими параметрами F_3 и β_3 , найденными по описанной выше методике, примененной к трехкомпонентным расплавам. Тогда будем иметь:

$$\sigma_3(x) = \beta_3 \frac{(F_3 - 1)(1-x)x}{1 + (F_3 - 1)x} + \sigma_{AB}(1-x) + \sigma_C x \quad (13)$$

Здесь x – концентрация добавляемого компонента C .

Результаты расчетов изотермы ПН по (13) для трехкомпонентных сплавов $Na:K(9:1)+Cs$, $-Na:Cs(1:1)+K$ и $Na:Cs(0,634:1)+K$ представлены на рис. 3.

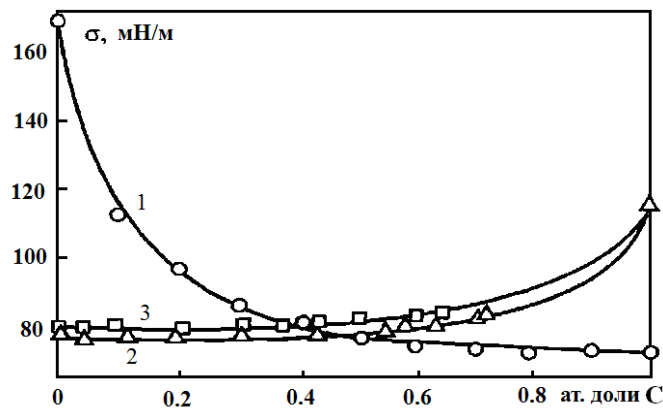


Рисунок 3 – Зависимость ПН (или $\sigma(x)$) трехкомпонентных сплавов от концентрации x добавляемых компонентов цезия и калия:

1 - $Na:K(9:1)+Cs$, 2 - $Na:Cs(1:1)+K$ и 3 - $Na:Cs(0,634:1)+K$.

На примерах шести бинарных систем щелочных металлов, десяти систем расплавов p -металлов, а также трех трехкомпонентных систем показано, что уравнение (6) и (13) описывают изотермы ПН двух- и трехкомпонентных систем с высокой точностью. При этом допускаемая ошибка в среднем не больше 1%.

В третьей главе приводятся полученные с использованием уравнения (6) формулы для расчетов адсорбций $\Gamma_i^N(x)$ и поверхностных концентраций $x_i^o(x)$ компонентов сплавов, где x – содержания добавляемых компонентов в объемах бинарных и трехкомпонентных расплавов, а также результаты вычислений этих параметров для некоторых систем щелочных и p -металлов.

Продифференцировав (6) по x , и подставляя полученное выражение в формулу Гуггенгейма-Адама для адсорбции

$$\Gamma_B^N(x) = -\frac{(1-x)x}{RT} \left(\frac{\partial \sigma(x)}{\partial x} \right)_{P,T}, \quad (14)$$

получим формулу для расчета адсорбции добавляемого компонента в бинарный расплав

$$\Gamma_B^N(x) = -\frac{(1-x)x}{RT} \left[\frac{\beta_2(F_2-1)(1-2x-(F_2-1)x^2)}{[1+(F_2-1)x]^2} - (\sigma_A - \sigma_B) \right]. \quad (15)$$

Формула (15) позволяет вычислить адсорбцию без применения методики графического (ручного) дифференцирования экспериментальной изотермы ПН бинарной системы, а также получить более точные значения частной производной $(\partial \sigma / \partial x)_{P,T}$. При использовании (14) для трехкомпонентных систем необходимо указать направление, по которому берется производная, то есть, нужно использовать величину $(\partial \sigma / \partial x)_{P,T,x_A/x_B}$.

Уравнение (15) нами использована для расчета адсорбции калия хорошо изученной в литературе системы Na-K (рис. 4).

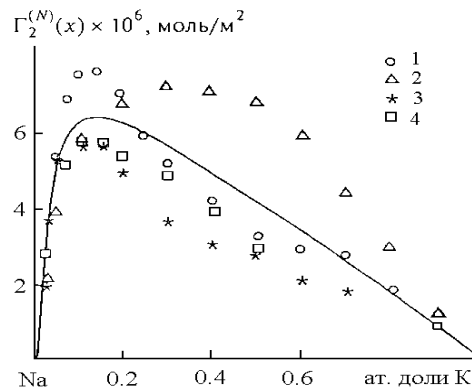


Рисунок 4 – Сравнение результатов расчета адсорбции калия в системе Na-K по формуле (15) (сплошная линия) с данными, полученными (точки) по (14):

1 – без учета термодинамической активности калия; 2 – с учетом термодинамической активности калия; 3 – компьютерный расчет изотермы ПН по известной традиционной методике; 4 – графическое дифференцирование изотермы ПН.

Из рис. 4 видно, что результаты расчетов адсорбции калия по (15) в системе Na-K (сплошная линия) являются усредняющими относительно данных других авторов.

Далее показано, что для трехкомпонентных систем *A-B-C* адсорбцию 3-го компонента можно вычислить формулой (15). Тогда, имея в виду известное выражение

$$\Gamma_C^{(N)}(x) = \frac{x_C^\omega - x_C}{\omega_0^\omega}, \quad (16)$$

для адсорбции добавляемого компонента *C*, где ω_0^ω - молярная поверхность раствора поверхностного слоя, можем выразить адсорбцию остальных двух компонентов *A* и *B* через адсорбцию третьего компонента (16):

$$\Gamma_A^N(x) = \frac{x_A^\omega - x_A}{x_C^\omega - x_C} \cdot \Gamma_C^N(x); \quad (17)$$

$$\Gamma_B^N(x) = \frac{x_B^\omega - x_B}{x_C^\omega - x_C} \cdot \Gamma_C^N(x), \quad (18)$$

где выражения для x_A^ω , x_B^ω и x_C^ω будут приведены ниже.

Результаты расчетов адсорбции компонентов в системе *Na:Cs(1:11)+K* по формулам (15)-(18) представлены на рис. 5.

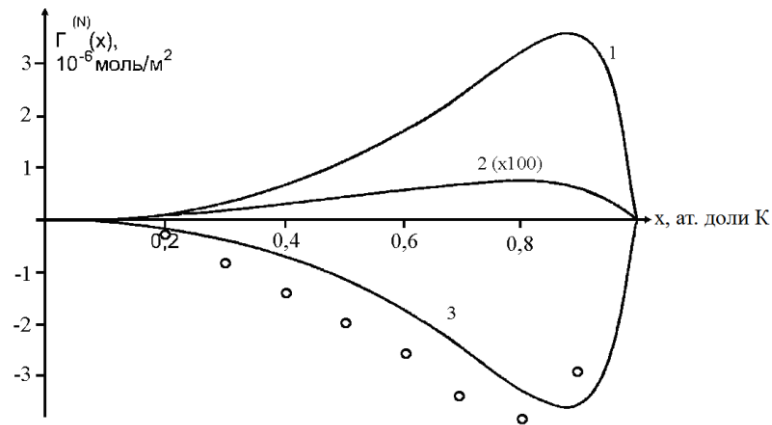


Рисунок 5 – Зависимость адсорбции компонентов от содержания калия в объеме раствора системы $Na/Cs(1:11)+K$: 1- Cs ; 2- $Na(\Gamma_{Na}^N(x) \times 100)$; 3- K . Сплошные линии - расчет по формулам (15)-(18), точки - расчет традиционным способом (14).

Как видно из рис. 5, на поверхность трехкомпонентного сплава преимущественно выходят атомы цезия, добавляемый компонент - калий уходит в объем, а содержание растворителя - натрия в поверхностном слое практически не меняется, хотя из кривой 2 видно небольшое его увеличение на поверхности. Этот эффект вытягивания цезием атомов натрия на поверхность расплава на два порядка меньше изменений поверхностных концентраций остальных компонентов.

Далее уравнения (6) и (13) были использованы для вычисления предельной поверхностной активности добавляемого компонента по Ребиндеру для бинарной системы

$$a = -\lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)_{P,T} . \quad (19)$$

Вычислив производную функции (6) по переменной x и, подставляя ее в (19) при $x \rightarrow 0$, получим формулу для оценки величины поверхностной активности второго компонента B системы $A-B$

$$a = -\beta(F-1) + (\sigma_A - \sigma_B). \quad (20)$$

Вычисленные нами значения активности a для K , Rb и Cs в системах $K-Na$, $K-Cs$ и $Na-Cs$ равны, соответственно 539; 288,5 и 4873 мН/м.

Также как и для бинарных расплавов, из уравнений (15) и (19) получим выражение для предельной поверхностной активности по Ребиндеру для компонента C в трехкомпонентном расплаве $(A:B)+C$

$$a_C = -\lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)_{P,T,x_A/x_B} = -\beta_3(F_3-1) + (\sigma_{AB} - \sigma_C). \quad (21)$$

Полученные нами значения активностей a калия и цезия для трехкомпонентных систем $Na:Cs(1:1)+K$, $Na-K(9:1)+Cs$ и $Na:Cs(0,634:1)+K$ равны соответственно 72,1; 977,6 и 76,6 мН/м.

Из (20) и (21) видно, что величина поверхностной активности компонента зависит не только от $(\sigma_A - \sigma_B)$, но и от произведения $\beta(F-1)$.

Четвертая глава посвящена практическому применению полученных выше выражений. Здесь приводятся результаты расчетов поверхностных

концентраций компонентов бинарных и трехкомпонентных расплавов, разработанные методики прогнозирования поверхностных свойств расплавов бинарных и трехкомпонентных систем. Рассмотрим их последовательно.

1. Расчет состава поверхностного слоя расплава бинарной системы

Для расчета состава поверхностного слоя x_i^{ω} , где $i=A$ и B бинарного расплава используются известные выражения:

$$x_A^{\omega} = \frac{1 - x_B}{1 + (F_2 - 1)x_B} ; \quad (22)$$

$$x_B^{\omega} = \frac{F_2 \cdot x_B}{1 + (F_2 - 1)x_B} . \quad (23)$$

где x_B – содержание второго компонента в объеме расплава бинарной системы $A-B$. Параметр F_2 вычисляется из данных экспериментов по изучению изотермы ПН системы $A-B$ по методике разработанной на основе уравнения изотермы ПН (6).

Заметим, что формулы (22) и (23) являются точными, поэтому можем полагать, что результаты, полученные с использованием этих формул близки к истинным значениям.

Результаты расчетов изотерм концентраций компонентов в поверхностном слое x_i^{ω} в зависимости от содержания цезия в объеме x бинарного расплава по формулам (22) и (23) в системе $Na-Cs$ представлены на рис. 6.

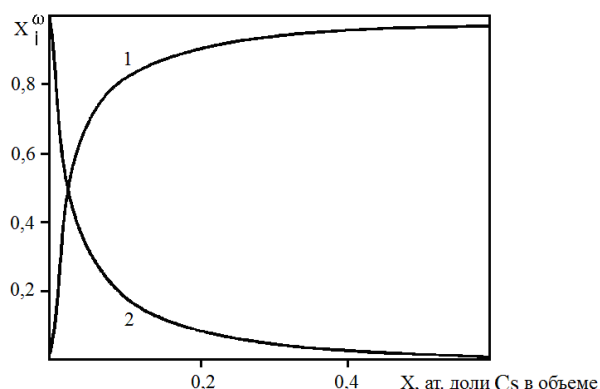


Рисунок 6 – Зависимость состава поверхностного слоя расплавов системы $Na-Cs$ от содержания цезия в объеме расплава: 1 - Cs , 2 – Na , вычисленные по (22) и (23).

2. Расчет состава поверхностного слоя расплава трехкомпонентной системы

Расчет состава поверхностного слоя расплава трехкомпонентной системы проводится для расплавов, принадлежащих определенному лучевому сечению треугольника состава трехкомпонентной системы $A-B-C$.

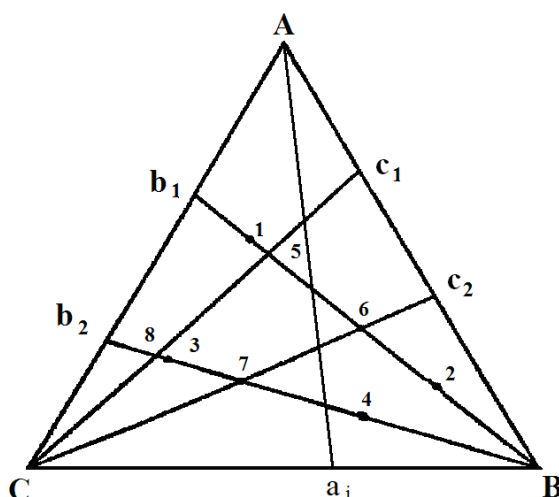


Рисунок 7 – К расчету поверхностных свойств расплавов тройной системы A - B - C .

Например, в случае, когда сплавы образованы по следующей методике: к двухкомпонентному сплаву состава x'_A и x'_B , где $x'_A/x'_B = \alpha = const$, добавляют третий компонент C . Очевидно, что при этом состав трехкомпонентного расплава будет меняться по линии (см. рис. 7) $c_1 - C$, где $c_1 = \alpha$.

Определив параметр F_3 трехкомпонентной системы, соответствующей лучевому сечению $c_1 - C$ по методике, приведенной выше, можем вычислить величины x_i^ω , ($i=A, B$ и C), по формулам:

$$x_A^\omega = \frac{\alpha(1-x)}{1+\alpha[1+(F_3-1)x]} ; \quad (24)$$

$$x_B^\omega = \frac{1-x}{[1+(F_3-1)x][1+\alpha[1+(F_3-1)x]]} ; \quad (25)$$

$$x_C^\omega = \frac{F_3 \cdot x}{1+(F_3-1)x} . \quad (26)$$

Формулы (24)-(26) выражают концентрации компонентов в поверхностном слое раствора x_A^ω , x_B^ω и x_C^ω через объемную концентрацию добавляемого компонента C ($x_C = x$), и параметры F_3 и a , где F_3 - параметр адсорбции трехкомпонентного сплава, a - параметр, определяющий состав исходного бинарного раствора, использованного для образования расплавов рассматриваемого лучевого сечения $c_1 - C$ трехкомпонентной системы A - B - C .

В качестве примера использования предлагаемой методики расчета x_i^ω на рис. 8 приведены результаты расчетов по (24)-(26) содержания компонентов в поверхностном слое тройной системы $Na:Cs$ (1:11)+ K .

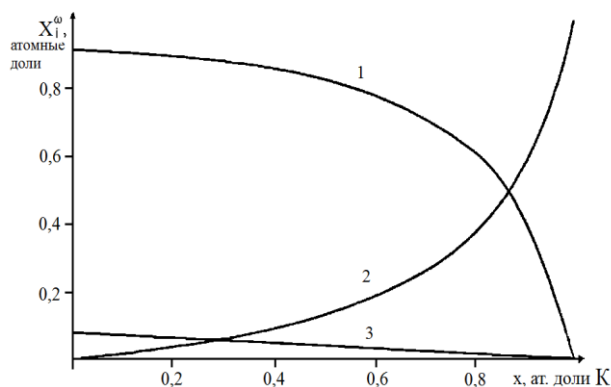


Рисунок 8 – Зависимость состава поверхностного слоя расплавов направления разреза $Na:Cs(1:11)+K$ от содержания калия в объеме раствора: 1- Cs; 2-K; 3-Na, вычисленные по формулам (24)-(26).

3. Прогнозирование поверхностных свойств двухкомпонентных расплавов

Очевидно, что для прогнозирования поверхностных свойств двухкомпонентных расплавов необходимо составить уравнение (6) изотермы ПН и иметь величины β_2 и F_2 . Высокая точность описания экспериментальных изотерм ПН бинарных систем с монотонным изменением ПН уравнением (6) позволяет нам предложить методику прогнозирования поверхностных свойств бинарных систем, которая заключается в следующем. Для изучения поверхностных свойств сплавов бинарной системы $A-B$ измеряют ПН чистых компонентов σ_A и σ_B или берут соответствующие значения при данной температуре из справочника. Затем готовят два расплава произвольных составов x_1 и x_2 и измеряют ПН этих расплавов $\sigma(x_1)$ и $\sigma(x_2)$. Вычисляют параметры F_2 и β_2 , по формулам (7)-(12). Подставляя найденные значения F_2 , β_2 , σ_A и σ_B в (6), составляют уравнение изотермы (6) для данной системы $A-B$ и вычисляют по (6), (22), (23), (15) значения $\sigma(x)$, x_A^0 , x_B^0 , $\Gamma_A^{(N)}(x)$, $\Gamma_B^{(N)}(x)$ и других параметров для любых составов поверхности расплавов бинарной системы $A-B$.

Такая методика построения изотерм ПН и определения состава поверхностного слоя и адсорбций компонентов позволяет сэкономить время, дорогостоящие материалы, а также дает более точные результаты вычисляемых характеристик поверхности по сравнению с традиционной методикой, основанной на уравнении (14) и других известных уравнений по изотермам ПН.

4. Методика прогнозирования поверхностных свойств расплавов тройных систем

Определение поверхностных характеристик тройных систем представляет трудоемкую задачу – требует много времени и дорогостоящих чистых материалов [1]. Чтобы уменьшить затраты на изучение трехкомпонентных систем в настоящей работе разработана методика прогнозирования поверхностных свойств сплавов тройных систем.

Выбирая произвольно составы расплавов боковых бинарных систем $A-B$, $B-C$ и $C-A$ (по два расплава с составами x_1 и x_2 – для каждой боковой системы) определяем ПН каждого из них. Имея эти данные по методике (см. раздел 4.2), составляем уравнение типа (4.2.1) для каждой боковой системы

$$\sigma_{ij} = \beta_{ij} \frac{(F_{ij} - 1)(1 - x_k)x_k}{1 + (F_{ij} - 1)x_k} + \sigma_i(1 - x_k) + \sigma_j x_k . \quad (27)$$

Здесь $i, j = A, B$ и C , $i \neq j$, $k=1,2$.

Имея эти уравнения, мы можем вычислить ПН любого расплава боковых бинарных систем $A-B$, $B-C$ и $C-A$ (рис.7).

Выбираем произвольно на стороне $A-C$ треугольника ABC два расплава с составами x_1 и x_2 ($x_1, x_2 = x$ – концентрация добовляемого (второго) компонента рассматриваемой бинарной системы). Отношения $x_1/(1-x_1)=b_1$ и $x_2/(1-x_2)=b_2$ определяют составы расплавов с составами x_1 и x_2 бинарной системы $A-C$.

Соединив вершину B треугольника составов ABC с точками b_1 и b_2 на стороне $A-C$, получим два лучевых сечения $B-b_1$ и $B-b_2$ треугольника составов системы $A-B-C$. Составим уравнение изотермы ПН одного из этих двух сечений, например, сечения $B-b_1$. Для этого приготовим два расплава произвольных составов x_1 и x_2 , принадлежащих данному сечению $B-b_1$ по следующей методике [1]. Приготовим расплав бинарной системы $A-C$ с составом x_{C1} и добавим к нему определенное количество m_{B1} компонента B . Мы получим трехкомпонентный раствор, принадлежащий сечению $B-b_1$. Измерим его ПН σ_{B1} . Добавим еще к имеющемуся раствору 1 некоторое количество компонента B и получим трехкомпонентный раствор 2, также принадлежащий сечению $B-b_1$ (см. рис. 7). Измерим его ПН σ_{B2} . Итак, мы получили полный набор необходимых данных для составления уравнения изотермы ПН данного сечения $B-b_1$: σ_{b1} , σ_B , $\sigma_{b1}(x_1)$, $\sigma_{b2}(x_2)$, x_1 и x_2 . Вычислим значения β_{B-b1} и F_{B-b1} по формулам (7)-(12). Подставляя значения β_{B-b1} , F_{B-b1} , σ_{b1} , σ_B в (27), получим уравнение изотермы ПН сечения $B-b_1$

$$\sigma_{B-b1}(x) = \beta_{B-b1} \frac{(F_{B-b1} - 1)(1 - x)x}{1 + (F_{B-b1} - 1)x} + \sigma_{b1}(1 - x) + \sigma_B \cdot x . \quad (28)$$

Поступая также, получим уравнение изотермы ПН сечения $B-b_2$

$$\sigma_{B-b2}(x) = \beta_{B-b2} \frac{(F_{B-b2} - 1)(1 - x)x}{1 + (F_{B-b2} - 1)x} + \sigma_{b2}(1 - x) + \sigma_B \cdot x . \quad (29)$$

Далее, составим уравнения изотерм ПН сечений другого направления, например, $C-c_1$ и $C-c_2$. Для этого, так же произвольно, как и выше, выбираем два расплава боковой бинарной системы AB , соответствующих точкам $c_1=x_{B1}/(1-x_{B1})$ и $c_2=x_{B2}/(1-x_{B2})$. Имея составы этих точек (c_1 и c_2), то есть x_{c1} и x_{c2} , вычислим ПН этих расплавов σ_{c1} и σ_{c2} . Соединим точки c_1 и c_2 с вершиной C треугольника ABC , получим линии сечений $C-c_1$ и $C-c_2$. Эти линии пересекаются с линиями $B-b_1$ и $B-b_2$ в точках 5,6,7 и 8 (рис. 7). Составы расплавов, соответствующих точкам 5, 6, 7 и 8, найдем из очевидных соотношений. Например, для точки 5 будем иметь:

$$\left. \begin{aligned} x_{A5} + x_{B5} + x_{C5} &= 1 \\ x_{A5} / x_{B5} &= c_1 \\ x_{A5} / x_{C5} &= b_1 \end{aligned} \right\} \quad (30)$$

Из решения системы (30) найдем значения x_{A5} , x_{B5} и x_{C5} для точки 5 (рис. 7):

$$\left. \begin{aligned} x_{A_5} &= \frac{c_1 b_1}{c_1 + b_1 + c_1 b_1}; \\ x_{B_5} &= \frac{b_1}{c_1 + b_1 + c_1 b_1}; \\ x_{C_5} &= \frac{c_1}{c_1 + b_1 + c_1 b_1}. \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

По такой же схеме вычислим концентрации x_{A_8} , x_{B_8} и x_{C_8} компонентов A , B и C в точке 8:

$$\left. \begin{aligned} x_{A_8} &= \frac{c_1 b_2}{c_1 + b_2 + c_1 b_2}; \\ x_{B_8} &= \frac{b_2}{c_1 + b_2 + c_1 b_2}; \\ x_{C_8} &= \frac{c_1}{c_1 + b_2 + c_1 b_2}. \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Подставляя значения x_{A_5} , x_{B_5} , x_{C_5} и x_{A_8} , x_{B_8} , x_{C_8} в (4.3.2) и (4.3.3) найдем значения ПН $\sigma_{C-c1}(x_8)$ и $\sigma_{C-c2}(x_8)$ в точках 5 и 8 рис. 7.

Таким образом, мы получим полный набор данных σ_c , $\sigma_{C-c1}(x_5)$, $\sigma_{C-c1}(x_8)$, σ_{c1} , x_{c5} и x_{c8} для расчетов значений β_{C-c1} и F_{C-c1} . Вычислим значения β_{C-c1} и F_{C-c1} по формулам (7)-(12). Имея эти данные и значения σ_{c1} и σ_c , составим уравнение изотермы ПН для сечения $C-c_1$:

$$\sigma_{C-c1}(x) = \beta_{C-c1} \frac{(F_{C-c1} - 1)(1-x)x}{1 + (F_{C-c1} - 1)x} + \sigma_{B1}(1-x) + \sigma_c x. \quad (33)$$

По такой же схеме составим уравнение изотермы ПН для направления сечения $C-c_2$:

$$\sigma_{C-c2}(x) = \beta_{C-c2} \frac{(F_{C-c2} - 1)(1-x)x}{1 + (F_{C-c2} - 1)x} + \sigma_{B2}(1-x) + \sigma_c x. \quad (34)$$

Направления разрезов $C-c_1$ и $C-c_2$ нами были выбраны совершенно произвольно. Поэтому можем сказать, что данная методика позволяет построить изотермы ПН любого направления разреза не только в направлениях $B-b_i$, $C-c_i$, но и в направлениях $A-a_i$ тройной системы $A-B-C$.

Имея эти уравнения изотерм ПН, а также значения F_{ij} и σ_i , можно рассчитать все другие характеристики поверхностей расплавов тройных систем.

В качестве примера разработанная методика была применена для описания изотерм ПН изученных экспериментально тройной системы $Na-K-Cs$. При этом в качестве опорных брали разрезы b_1-K и b_2-K , где K - калий. Расчеты изотерм ПН проводили для разрезов c_1-Cs , c_2-Cs и c_3-Cs , где $b_1 = 5,8$ и $b_2 = 0,764$, а $a_1 = 4$; $a_2 = 0,428$ и $a_3 = 0,111$.

Входные данные для расчета изотерм ПН боковых систем $Na-K$, $Na-Cs$ и $K-Cs$ по формуле (6) представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1. Входные данные для расчетов изотерм ПН боковых бинарных систем

№ пп	Система	σ_a	σ_b	x_1	$\sigma(x_1)$	x_2	$\sigma(x_2)$	$\beta_1, \text{мН/м}$	F_i
1	Na-K	205	113,9	0,1	169	0,3	140	-89,4	6,01
2	Na-Cs	205	71,4	0,1	106	0,3	88	-119,1	40,7
3	K-Cs	113,9	71,4	0,1	94,6	0,3	80	-50,2	5,9

Вычисленные значения ПН в точках b_i и c_i приведены в табл. 4.2.

Таблица 4.2. Сравнение результатов расчетов ПН трехкомпонентных сплавов системы Na-K-Cs с данными эксперимента [3] в точках 5, 6, 7 и 8

Точки	5	6	7	8
x_{K_i}	0,176	0,667	0,503	0,098
σ_p	100,0	104,1	80,7	79,3
$\sigma_{\Sigma}, [3]$	100,2	103,2	81,0	78,8

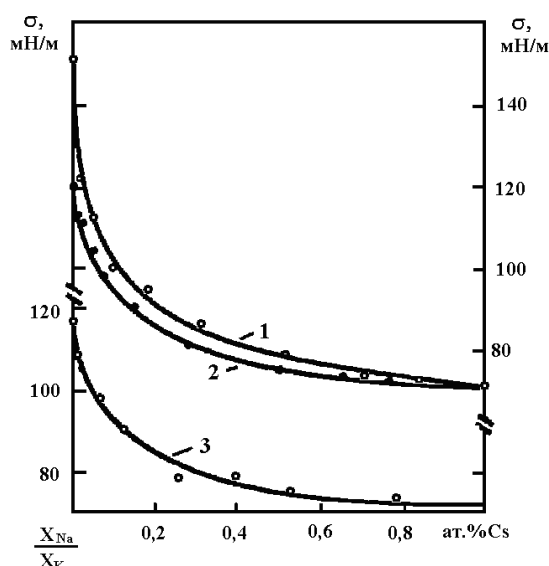


Рисунок 9 – Сравнение результатов наших расчетов изотерм ПН трехкомпонентных сплавов (сплошные линии), полученные по разработанной методике, с данными экспериментов [2] (точки) (1 – c_1 - Cs; 2 – c_2 - Cs; 3 – c_3 - Cs).

Из сравнения результатов расчетов значений ПН по предложенной методике с данными экспериментов [2, 3] видно вполне удовлетворительное их согласие. Это означает, что разработанную методику можно использовать для прогнозирования свойств поверхности трехкомпонентных расплавов любых выбранных сечений.

Основные результаты и выводы:

1. Обзор экспериментальных изотерм поверхностного натяжения (ПН) бинарных металлических систем показывает, что по характеру изменения ПН бинарные системы можно разделить на две большие группы:
 - а) бинарные системы с монотонным изменением ПН (их более половины из изученных);
 - б) бинарные системы с особенностями на изотермах ПН (изломы, экстремумы, точки перегиба и т.п.) Причинами таких изменений ПН являются появление в системе, кроме основных компонентов, молекул химсоединений типа A_nB_m , квазимолекулярных образований: кластеров, группировок атомов и т.п., устойчивых при температурах измерений ПН.
2. Для бинарных систем с монотонным изменением ПН (для первой группы, см. п1) выведено двухпараметрическое уравнение изотермы ПН. Предложена методика определения параметров β и F уравнения изотермы ПН, позволившая определить важнейший параметр поверхности расплава F -константу обмена частицами поверхностного слоя расплава с его объемом. Показано, что предложенное уравнение изотермы ПН позволяет описать монотонно меняющиеся изотермы ПН бинарных и трехкомпонентных систем с высокой точностью во всей области составов. Допускаемая относительная погрешность в среднем около 1%.
3. Получено аналитическое выражение для расчета адсорбции добавляемого в раствор компонента. Показано, что величина адсорбции определяется не только разностью ПН чистых компонентов ($\sigma_A - \sigma_B$), но и произведением $\beta(F-1)$. От знаков этих слагаемых и величины F зависят величина и характер адсорбций компонента.
4. Предложенное уравнение изотермы ПН позволяет вычислить адсорбции компонентов расплава в N -варианте Гуггенгейма – Адама без использования процедуры графического (ручного) дифференцирования изотермы ПН системы. Показано, что предложенное уравнение изотермы ПН позволяет значительно уменьшить ошибки (до 1%) допускаемые при вычислениях адсорбции компонентов расплава традиционным способом.
5. Предложены методики построения изотерм ПН, адсорбций, поверхностных концентраций компонентов двухкомпонентных систем во всей концентрационной области с использованием экспериментальных значений ПН всего лишь двух расплавов произвольных составов. Показано, что предложенную методику можно применить и к трехкомпонентным системам.
6. На основе полученных выражений изотерм ПН, адсорбций и поверхностных концентраций компонентов x_i^o расплава удалось разработать методику прогнозирования поверхностных свойств трехкомпонентных расплавов произвольно выбранных сечений (например, $B-b_i$) треугольника составов с

использованием экспериментальных данных по ПН всего-лишь четырех внутренних трехкомпонентных расплавов.

7. Показано, что предложенные способы построения изотерм ПН, адсорбций и поверхностных концентраций во многом облегчают труд экспериментатора, повышают точность определяемых параметров, уменьшают время затрачиваемое на получение информации о поверхности расплавов. Определен минимальный набор входных данных, разработан алгоритм, составлен пакет Программы для расчетов поверхностных свойств расплавов бинарных и трехкомпонентных металлических систем.

Список использованной литературы

1. Дадашев Р.Х. Термодинамика поверхностных явлений / Р.Х.Дадашев. – М.: Физматлит, 2007. - 280с.
2. Таова Т.М. К расчету поверхностного натяжения системы Na-K-Cs с использованием данных для сплавов, лежащих на линиях разрезов, идущих к одной из вершин треугольников составов //Расплавы 2007, №1. С.68-75.
3. Алчагиров Б.Б., Карамурзов Б.С., Таова Т.М., Хоконов Х.Б. Плотность и поверхностные свойства щелочных и легкоплавких металлов и сплавов. Нальчик Кааб.-Бал. Ун-т, 2011. С. 214.

Основное содержание диссертаций опубликовано в работах

1. Калажоков Замир Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения расплавов многокомпонентных металлических систем / Замир Х.Калажоков, К.В.Зихова, З.Х.Калажоков, Х.Х.Калажоков, Т.М.Таова // ТВТ. - 2012. - Т.50, №3. - С.469-472. **(из перечня ВАК)**
2. Калажоков З.Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения и адсорбций бинарных систем р-металлов / З.Х.Калажоков, К.В.Зихова, Заур Х.Калажоков, Х.Х.Калажоков, Х.Б.Хоконов // Теплофизика высоких температур. - 2012. - Том 50, №6. - С.781-784. **(из перечня ВАК)**
3. Калажоков З.Х. К расчету адсорбций компонентов бинарных расплавов металлических систем / З.Х.Калажоков, К.В.Зихова, Зур Х.Калажоков, З.В.Барагунова, Х.Х.Калажоков // Теплофизика высоких температур. - 2016. - Том 54, №4. - С. 636-639. **(из перечня ВАК)**
4. Калажоков З.Х. Методика прогнозирования поверхностных свойств сплавов, используемых в электронной технике в качестве основы фотокатодов / З.Х.Калажоков, К.В.Зихова, М.А.Дзакуреев, Заур Х.Калажоков, Б.С.Карамурзов, Х.Х.Калажоков, Х.Б.Хоконов // Известие КБГУ. - 2011. - Том I, №3. - С.38-43. **(из перечня ВАК)**
5. Калажоков З.Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения и адсорбции компонентов в расплавах металлических систем / З.Х.Калажоков, К.В.Зихова, Зур Х.Калажоков, Н.С.Реуцкая, Х.Х.Калажоков, Т.М.Таова, Х.Б.Хоконов // Известие КБГУ. - 2011. - Том I, №2. - С.15-22. **(из перечня ВАК)**

6. Зихова К.В. Расчет концентрационной зависимости работы выхода электрона бинарных сплавов / К.В.Зихова, З.Х.Калажоков, Заур Х.Калажоков, Х.Х.Калажоков // Известие вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2010. - №6. - С.47-49. **(из перечня ВАК)**
7. Зихова К.В. Расчет концентрационной зависимости работы выхода электрона сплавов трехкомпонентных систем / К.В.Зихова, Заур Х.Калажоков, З.Х.Калажоков, Х.Х.Калажоков // Журнал Известие вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2010. - №6. - С. 53-55. **(из перечня ВАК)**
8. Калажоков З.Х. Прогнозирование поверхностных свойств трехкомпонентных расплавов / З.Х.Калажоков, К.В.Зихова, Заур Х.Калажоков, Б.С.Карамурзов, Х.Х.Калажоков, Х.Б.Хоконов // Вестник академии наук Чеченской Республики. - 2011. - №1 (14) - С.26-32.
9. Калажоков З.Х. Расчет поверхностных концентраций и адсорбций компонентов бинарных и трехкомпонентных металлических сплавов / З.Х.Калажоков, А.Альсурайхи, К.В.Зихова, Заур.Х.Калажоков, М.А.Дзакуреев, Б.С.Карамурзов, Х.Х.Калажоков, Х.Б.Хоконов // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы». - 18-23 сен. - 2012г. - С.39-42.
10. Калажоков З.Х. Об одном уравнении изотермы поверхностного натяжения расплавов бинарных металлических систем / З.Х.Калажоков, Зур Х.Калажоков, Э.Х.Шериева, К.В.Зихова, З.В.Барагунова, Х.Х.Калажоков, Х.Б.Хоконов // Всероссийская научнопрактическая конференция «Актуальные проблемы современного материаловедения». - 2015. - С. 108-115.
11. Калажоков З.Х. Расчет адсорбций компонентов бинарных сплавов систем щелочных металлов / З.Х.Калажоков, Заур Х.Калажоков, З.В.Карданова, Н.С.Реуцкая, А.Альсурайхи, К.В.Зихова, М.А.Дзакуреев, Х.Х.Калажоков, Т.М.Таова // Вестник ТвГУ. Серия Физика. - 2013. - Выпуск 21. - С. 49-52.
12. Калажоков З.Х. Расчет адсорбций компонентов в двух- и трехкомпонентных расплавах / З.Х.Калажоков, Заур Х.Калажоков, Б.С.Карамурзов, Х.Х.Калажоков, К.В.Зихова, Х.Б.Хоконов // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы». - 19-23 сен., 2011. - С.75-78.
13. Барсокова К.В. Расчет адсорбции и активности поверхностно-активного компонента в бинарных металлических системах / К.В.Барсокова, З.Х.Калажоков, Заур Х.Калажоков, Х.Х.Калажоков // Труды 2-го международного междисциплинарного симпозиума «Физика низкоразмерных систем и поверхностей». - 2010 — С. 108-110.
14. Калажоков З.Х. Расчет составов поверхностных растворов бинарных и трехкомпонентных расплавов металлических систем / З.Х.Калажоков, Заур Х.Калажоков, Б.С.Карамурзов, Х.Х.Калажоков, К.В.Зихова, Х.Б.Хоконов // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы». - 19-23 сен., 2011г. - С. 79-81.
15. Калажоков З.Х., Барсокова К.В., Калажоков Заур Х., К расчету концентрационной зависимости поверхностного натяжения сплавов металлических систем / З.Х.Калажоков, К.В.Барсокова, Заур Х.Калажоков,

Т.М.Таова // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика межфазных границ и фазовые переходы». - 2010 — С. 104-107.

16. Зихова К.В., Калажоков З.Х., Калажоков Заур.Х., Реуцкая Н.С., Таова Т.М., Калажоков Х.Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения и адсорбции многокомпонентных сплавов / К.В.Зихова, З.Х.Калажоков, Заур Х.Калажоков, Н.С.Реуцкая, Т.М.Таова, Х.Х.Калажоков // XIII Российская конференция по теплофизическим свойствам веществ. Тезисы докладов. - 28 июня – 1 июля 2011. – С. 220-221.

17. Калажоков З.Х. Расчет изотерм поверхностного натяжения и адсорбции бинарных сплавов металлических систем / З.Х.Калажоков, К.В.Зихова, Заур Х.Калажоков, Х.Х.Калажоков, Х.Б.Хоконов // XIII Российская конференция по теплофизическим свойствам веществ. Тезисы докладов. - 28 июня – 1 июля 2011. – С.225-226.

18. Калажоков З.Х. Расчет изотерм адсорбции компонентов бинарных расплавов систем щелочных металлов / З.Х.Калажоков, Зур Х.Калажоков, К.В.Зихова, З.В.Барагунова, Н.С.Реуцкая, Э.Х.Шериева, Х.Х.Калажоков // Сборник научных трудов академии наук Чеченской республики. - 2016. - №5. - С. 211-219.