

ЗИХОВА КАРИНА ВИЛИКОВНА

**РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОВЕРХНОСТЕЙ
РАСПЛАВОВ БИНАРНЫХ И ТРОЙНЫХ СИСТЕМ**

01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нальчик - 2019

Работа выполнена на кафедре теоретической и экспериментальной физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент
Калажоков Хамидби Хажисмелович

Официальные оппоненты: **Дохов Магомед Пашевич**,
доктор технических наук, профессор, ФГБОУ ВО
«Кабардино-Балкарский государственный аграрный
университет им. В.М. Кокова», (г. Нальчик),
профессор

Элимханов Джабраил Зайндиевич,
кандидат физико-математических наук, заместитель
директора Центра проблем материаловедения
«Академия наук Чеченской Республики» (г.
Грозный)

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

Защита состоится «27» ноября 2019 года в 13 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета Д 212.076.02, созданного на базе ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» по адресу: 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

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

Автореферат разослан «_____» _____ 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Д 212.076.02

Ахкубеков Анатолий Амишевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. К настоящему времени разработаны уникальные приборы и методики для изучения поверхностных свойств твердых тел. К сожалению, они не всегда могут быть использованы для определения свойств веществ в жидком состоянии или систем с легко летучими компонентами. Для решения задач, связанных с определением поверхностных свойств таких веществ приходится возвращаться к традиционным методам определения поверхностных свойств расплавов, например, к методу измерения поверхностного натяжения (ПН) и к определению через него других свойств поверхности. Однако, построение экспериментальной изотермы ПН требует много времени и средств. Например, чтобы построить экспериментальную изотерму ПН одной бинарной системы $A-B$, где A и B компоненты системы, требуется несколько месяцев каждодневной напряженной работы группы высококвалифицированных специалистов, а одной трехкомпонентной $A-B-C$ – несколько лет. Очевидно, что на все это уходит много времени, труда и средств. К тому же расчеты других параметров поверхности с использованием экспериментальных изотерм ПН в основном проводятся в приближении идеальных растворов с применением малопродуктивного и не достаточно точного метода графического дифференцирования экспериментальной изотермы ПН.

С другой стороны, для вычисления многих свойств поверхности необходимо иметь достаточно точное значение частной производной $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ от кривой изотермы ПН $(\sigma(x))$, что в настоящее время определяется вручную, графическим способом также недостаточно точно. Использование метода «парабол» или подбор полинома для более точного описания экспериментальных изотерм ПН или определения величины $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$, оставляет наши расчеты в рамках приближения идеальных растворов. К тому же, такие полиномы не имеют физической нагрузки.

Предлагают другой подход для решения отмеченных выше проблем – вывод надежного уравнения изотермы ПН, то есть, функции $\sigma(x)$, описывающей реальные изотермы ПН с достаточной точностью во всем концентрационном интервале, независимо от степени идеальности рассматриваемой системы. Существующие теоретические уравнения изотермы ПН, к сожалению, не позволяют описать с достаточной точностью экспериментальные изотермы бинарных систем, далеких от идеальности. Поэтому остается целая группа бинарных систем, изотермы которых описать известными

уравнениями изотерм ПН не удастся. Наличие достаточно точной аналитической изотермы ПН, описывающей экспериментальные изотермы ПН, независимо от степени идеальности, упростило бы существенно расчеты и уменьшило бы ошибки при вычислениях многих параметров поверхности расплавов, приближая последних к реальным их значениям. В связи с изложенным, становится очевидной актуальность установления надежной аналитической зависимости между ПН расплава и его составом, а также усовершенствования на основе такой зависимости методов расчета параметров поверхности.

Степень разработанности темы диссертации. В настоящее время в литературе накопился большой объем информации по экспериментальному изучению ПН расплавов бинарных и трехкомпонентных металлических систем, который требует тщательного анализа. Обработка результатов экспериментов по измерению ПН с целью извлечения различной информации о свойствах поверхности проводится на основе термодинамики Гиббса и метода слоя конечной толщины (Е.А. Гутгенгейм, А.И. Русанов). При этом во многие расчеты входят значения частных производных изотерм ПН $(\partial\sigma/\partial x)_{P,T}$, которые определяются, как правило, 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 поверхности расплавов на основе найденных $(\partial\sigma/\partial x)_{P,T}$, проводятся чаще в приближениях идеальных, реже регулярных растворов. Имеющиеся в литературе уравнения изотерм ПН, которые могли быть использованы для расчетов $(\partial\sigma/\partial x)_{P,T}$, 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.), становятся не всегда пригодными для практического их использования. К сожалению, в настоящее время нет надежного уравнения изотермы ПН, которое независимо от степени идеальности рассматриваемой системы, описывало бы экспериментальные изотермы ПН во всей области составов.

Цель диссертационной работы – установить аналитическую зависимость поверхностного натяжения (ПН, σ) от концентрации компонентов в расплавах бинарных металлических систем и на основе полученного выражения $\sigma(x)$ усовершенствовать существующие методы расчетов термодинамических параметров поверхностного слоя расплавов.

Для реализации поставленной цели поставлены и решены следующие задачи:

1. Провести критический анализ экспериментальных изотерм ПН, которые появились в литературе после выхода на свет монографии С.И. Попеля (1994г.) и выявить общие закономерности изменения ПН с составом расплава;
2. Получить эмпирическое уравнение для описания аналитической зависимости ПН (σ) бинарного расплава от его состава x – функцию $\sigma(x)$;
3. На основе полученного выражения $\sigma(x)$ разработать простые и надежные методы расчета термодинамических параметров поверхностного слоя двойных и тройных систем (изотерм ПН, адсорбции компонентов, состава поверхностного слоя и предельной поверхностной активности компонента и др.);
4. Разработка надежных и удобных в практическом применении методик прогнозирования поверхностных свойств расплавов бинарных и тройных металлических систем с использованием предложенного соотношения $\sigma(x)$ между ПН и составом расплава.

Научная новизна полученных результатов:

1. Впервые получено общее аналитическое выражение $\sigma(x)$, описывающее монотонно меняющиеся изотермы ПН с высокой точностью во всей концентрационной области, независимо от степени идеальности рассматриваемой системы. На основе этого уравнения разработана методика определения параметров β_i и F_i выражения $\sigma(x)$ бинарных систем ($i=2$);
2. Получено уравнение изотермы поверхностного натяжения тройных систем и разработана методика определения параметров β_i и F_i ($i=3$);
3. Показано что параметры β_i и F_i в полученном уравнении изотермы ПН бинарных ($i=2$) и трехкомпонентных ($i=3$) систем, имеют определенный физический смысл: β_i – изменение ПН, соответствующее выходу на поверхность одного моля поверхностно активного компонента, F_i – константа адсорбционного равновесия или константа обмена частицами свежесформированной поверхности расплава с его объемом, характеризующая распределение частиц между объемом и поверхностным слоем;
4. Разработаны методики для расчетов адсорбций компонентов, содержания компонентов в поверхностном слое (x_i^o) бинарных и трехкомпонентных расплавов, позволяющие обходить при расчетах величины $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ не достаточно точную и трудоемкую методику графического дифференцирования экспериментальной кривой изотермы ПН;
5. Впервые показано, что адсорбция добавляемого компонента зависит не только от разности ПН компонентов расплава, но и от произведения $\beta \times (F - 1)$;

6. Разработаны надежные и удобные в практическом применении методики прогнозирования поверхностных свойств двухкомпонентных и трехкомпонентных расплавов. Показано, что предложенные методики прогнозирования поверхностных свойств расплавов повышают точность определения параметров поверхности по сравнению с известными методами.

Теоретическая и практическая значимость полученных результатов:

Результаты критического анализа теоретических и экспериментальных изотерм ПН и сделанные выводы, новые идеи и гипотезы, на основе которых установлена связь между ПН и составами расплавов бинарных и тройных систем, новые методы расчетов адсорбции компонентов и состава поверхности расплавов могут быть использованы при развитии теории поверхностных явлений, в учебном процессе при преподавании в ВУЗ-х соответствующих спецкурсов. Предложенные уравнения изотерм ПН двух и трехкомпонентных систем могут быть использованы в научно исследовательских лабораториях для построения изотерм ПН с использованием экспериментальных данных по ПН всего-лишь двух пробных расплавов. Полученные выражения для расчетов адсорбций и поверхностных концентраций 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, установление связи ПН с составом расплава, 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

Приводимые ниже положения относятся к системам с монотонным изменением поверхностного натяжения (ПН) в зависимости от состава.

1. Абсолютное значение изменения ПН свежесформированной поверхности расплава $|\Delta\sigma(x)|$ при переходе из неравновесного в равновесное состояние пропорционально Δx^o - изменению содержания поверхностно-активного компонента в поверхностном слое расплава;
2. Введение параметра β - коэффициента пропорциональности между $\Delta\sigma(x)$ и Δx^o позволяет вычислить изменение ПН расплава состава x при переходе неравновесной свежесформированной поверхности в равновесное состояние;
3. Использование условия равновесия поверхностной и объемной фаз расплава при постоянных β и F позволило установить связь между ПН (σ) раствора и его составом (x);
4. Установленная в настоящей работе зависимость ПН расплава σ от его состава x - $\sigma(x)$ позволяет:
 - описать экспериментальные изотермы ПН идеальных, регулярных и далеких от идеальности бинарных и тройных систем во всей области составов;
 - определить параметры β и F бинарных и тройных систем из данных экспериментов по измерению ПН;
 - вычислить важнейший параметр поверхности расплава $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ с высокой точностью, обходя традиционную и недостаточно точную методику графического дифференцирования экспериментальной изотермы ПН;
 - построить изотермы адсорбции компонентов расплава в приближении реального раствора с использованием значений ПН всего-лишь двух расплавов разных составов.
5. Предложенные в работе новые соотношения между термодинамическими параметрами поверхностей и объемов расплавов бинарных и тройных систем, содержащие параметры β_i и F_i , позволяют получить данные о поверхности расплава, более близкие к реальным их значениям.
6. Разработанные методики прогнозирования поверхностных свойств расплавов позволяют:
 - значительно уменьшить объем экспериментальных работ, необходимых для полного изучения двух- и трехкомпонентных систем;
 - ускорить процесс получения информации о поверхности;
 - экономить материалы необходимые для проведения дорогостоящих экспериментов;
 - получить более точные результаты, чем при использовании известных методик.

Степень достоверности результатов подтверждается согласованностью предлагаемых теоретических выкладок существующим теоретическим положениям и удовлетворительным согласием полученных в работе результатов расчетов с данными наиболее надежных 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 и симпозиумах:

- 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.

- Национальная университетская научно-практическая конференция, приуроченная к 85-летию со дня основания Кабардино-Балкарского государственного университета. Нальчик: КБГУ, 2018г.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 19 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 17 таблиц, состоит из введения, четырех глав, выводов и списка литературы из 153 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

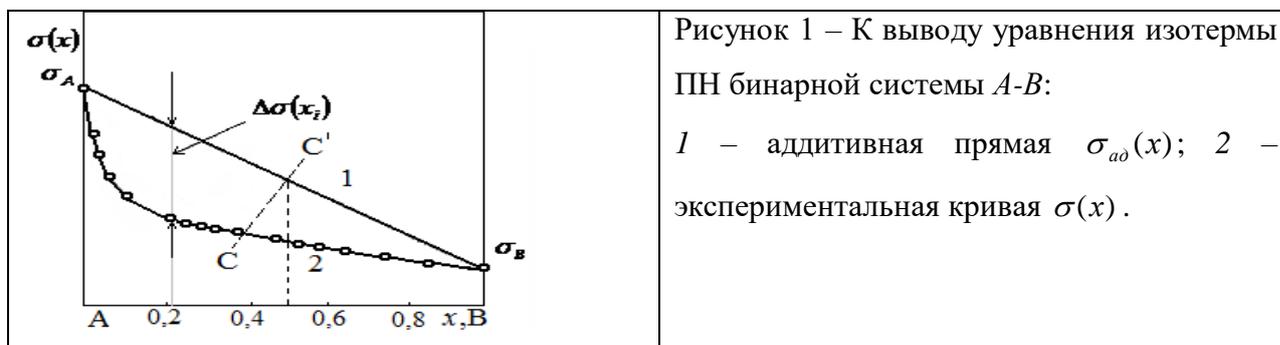
Во введении дается обоснование актуальности темы исследования, формулируются цель и задачи диссертационной работы, отмечается научная новизна, приводятся положения, выносимые на защиту и практическая значимость полученных в работе результатов.

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.

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 изотермы ПН 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 экспериментальной изотермы ПН с монотонным изменением ПН (рис.1, кривая 2).



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

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

(см.(1)), где $\sigma_{ad}(x)$ определено выражением (2). В (1) и (2) x_i –молярные доли компонента *i* расплава.

Причиной такой разницы между $\sigma(x)$ и $\sigma_{ad}(x)$ (1) является адсорбционная релаксация свежеобразованной 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 из условия равновесия можем записать равенство химпотенциалов компонента i в поверхностном и объемном фазах расплава

$$\mu_i^o = \mu_i \quad (3)$$

Из (3) было получено (Семенченко В.К. в 1932 г.) для избыточной концентрации второго компонента B бинарной системы $A-B$ выражение (4).

$$x^o - x = \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x} \quad \Delta\sigma(x) = \beta \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x} \quad (4), (5)$$

где β – коэффициент пропорциональности, не зависящий от состава раствора.

Далее, в настоящей работе из сравнения результатов расчетов ($x^o - x$) при различных F и данных $\Delta\sigma(x)$, полученных из экспериментальных изотерм ПН, предложено, что изменение ПН расплава при его переходе в равновесное состояние равно (5)

Тогда из (1), (2) и (5) следует выражение для изотермы ПН бинарной системы

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

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) 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:

$$\beta_2 = \frac{\Delta\sigma(x_1) \cdot \Delta\sigma(x_2)(x_2 - x_1)}{\Delta\sigma(x_1)f(x_2) - \Delta\sigma(x_2)f(x_1)}, \quad (7) \quad F_2 = 1 + \frac{\Delta\sigma_1(x_1)}{\beta_2 f(x_1) - \Delta\sigma(x_1)x_1}, \quad (8)$$

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.

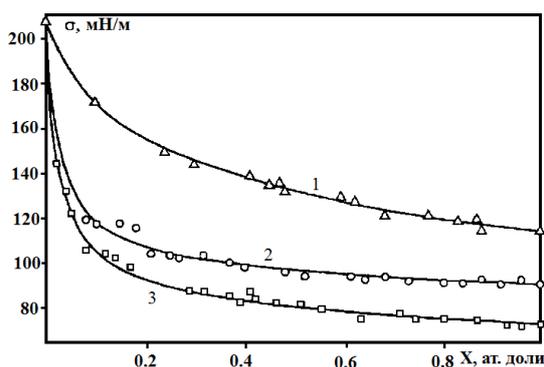


Рисунок 2 — Концентрационная зависимость ПН некоторых бинарных систем щелочных металлов $Na-K$; $Na-Rb$ и $Na-Cs$, рассчитанные по формуле (6) (сплошные линии). Точки -эксперимент: 1 - $Na-K$; 2- $Na-Rb$ и 3- $Na-Cs$.

Показано, что формулу (6) можно использовать и для описания изотерм ПН трехкомпонентных систем $A-B-C$ выбранного сечения, например, c_i-C (см. рис. 7). Для этого достаточно в (6) величину σ_A заменить ПН исходного бинарного расплава — σ_{AB} , который 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. 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 — молярные доли 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.

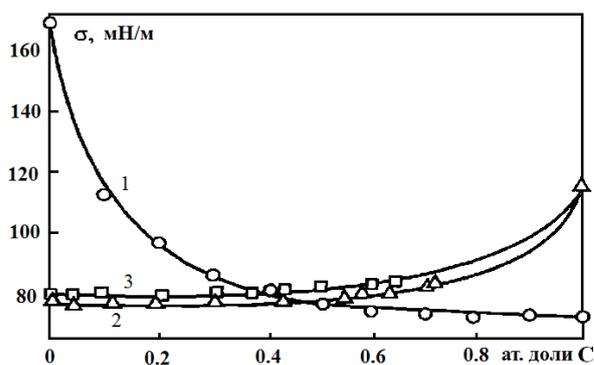


Рисунок 3 – Зависимость ПН (или $\sigma(x)$) трехкомпонентных сплавов от концентрации x добавляемых компонентов цезия и калия:

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

Практическое применение уравнений (6) и (13) для описания экспериментальных изотерм ПН двух- и трехкомпонентных систем щелочных и р-металлов показывает, что они описывают экспериментальные изотермы ПН во всей концентрационной области составов с высокой точностью. При этом допускаемая ошибка в среднем не больше 1%.

В третьей главе приводятся полученные с использованием уравнений (6) и (7) формулы для расчетов адсорбций $\Gamma_i^N(x)$ и поверхностных концентраций $x_i^o(x)$ компонентов расплавов, а также результаты вычислений этих параметров для некоторых бинарных и тройных систем щелочных и р-металлов.

Продифференцировав (6) по x , и подставляя полученное выражение в формулу N -варианта адсорбции

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

получим выражение 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).

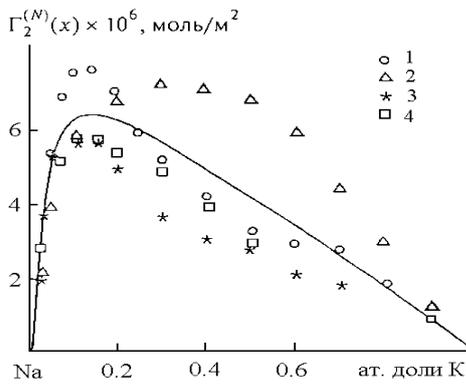


Рисунок 4 – Сравнение результатов расчета адсорбции калия в системе Na-K по формуле (15) (сплошная линия) с данными, полученными (точки) по (14):

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 с использованием формулы (15). Тогда, имея в виду известное выражение (16).

$$\Gamma_C^{(N)}(x) = \frac{x_C^\omega - x_C}{\omega_0^\omega} \quad (16) \quad \Gamma_B^N(x) = \frac{x_B^\omega - x_B}{x_C^\omega - x_C} \cdot \Gamma_C^N(x) \quad (17) \quad \Gamma_B^N(x) = \frac{x_B^\omega - x_B}{x_C^\omega - x_C} \cdot \Gamma_C^N(x), \quad (18)$$

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 (17) и (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.

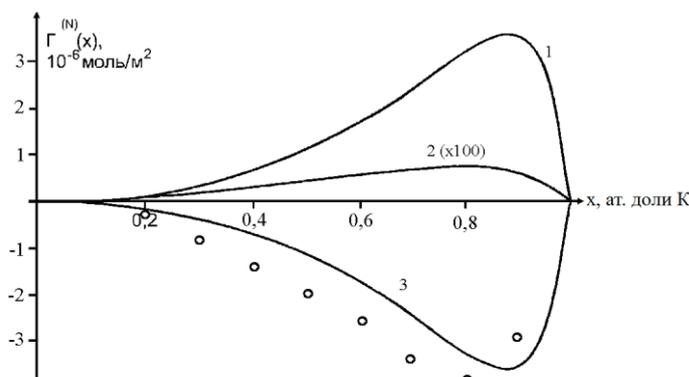


Рисунок 5 – Зависимость адсорбции компонентов от содержания калия в объеме раствора системы Na/Cs(1:11)+K: 1-Cs; 2-Na($\Gamma_{Na}^N(x) \times 100$); 3-K. Сплошные линии - расчет по формулам (15)-(18), точки - расчет традиционным способом (14).

Как видно из рис. 5, на поверхность трехкомпонентного расплава 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 (19) для бинарной (20) и тройной систем (21).

$$a = -\lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x} \right)_{P,T} (19) \quad a = -\beta_2 (F_2 - 1) + (\sigma_A - \sigma_B) (20) \quad a_C = -\beta_3 (F_3 - 1) + (\sigma_{AB} - \sigma_C) (21)$$

Полученные нами значения a_i по (20) и (21) для K , Rb и Cs в системах $K-Na$, $K-Cs$ и $Na-Cs$ и $Na:Cs(1:1)+K$, $Na-K(9:1)+Cs$ и $Na:Cs(0,634:1)+K$ равны 0,54; 3,21 и 4,87 Н/м и 0,07; 0,98 и 0,08 Н/м, соответственно.

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

Выражение (6) позволяет находить параметр F_2 из данных экспериментов по изучению изотерм ПН и воспользоваться известными выражениями для расчета состава поверхностного слоя x_i^ω , бинарного расплава:

$$x_A^\omega = \frac{1 - x_B}{1 + (F_2 - 1)x_B} ; (22) \quad x_B^\omega = \frac{F_2 \cdot x_B}{1 + (F_2 - 1)x_B}, (23)$$

где x_B – содержание второго компонента в объеме расплава бинарной системы $A-B$.

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

В качестве примера приведем 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 $Na-Cs$ (рис. 6).

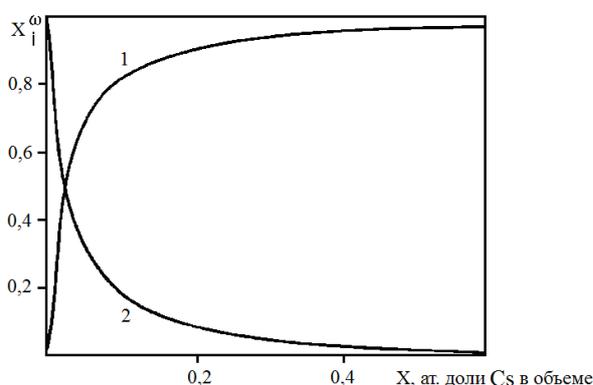
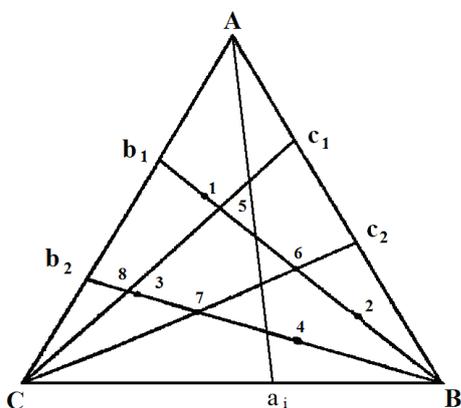


Рисунок 6 – Зависимость состава поверхностного слоя расплавов системы $Na-Cs$ от содержания цезия в объеме расплава: 1 - Cs , 2 – Na , вычисленные по (22) и (23).

Как видно из рис.6, поверхности расплавов системы $Na-Cs$ довольно быстро насыщается поверхностно активным компонентом - цезием.

2. Расчет состава поверхностного слоя расплава выбранного лучевого сечения треугольника составов трехкомпонентной системы $A-B-C$

Расчет состава поверхностного слоя расплава трехкомпонентной системы проводится для расплавов, принадлежащих определенному лучевому сечению треугольника состава трехкомпонентной 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), например, $c_1 - C$, где $c_1 = \alpha$.



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

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

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

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

Определив параметр F_3 трехкомпонентной системы, соответствующий лучевому сечению $c_1 - C$ по методике, приведенной выше (см.гл. II), можем вычислить величины x_i^o , ($i=A, B$ и C), по формулам предложенным в настоящей работе (24)-(26).

Формулы (24)-(26) выражают концентрации компонентов в поверхностном слое раствора x_A^o , x_B^o и x_C^o через объемную концентрацию добавляемого компонента C ($x_C = x$), и параметры F_3 и α , где F_3 - параметр адсорбции трехкомпонентного сплава, a_i , c_i и v_i (см. рис7), равные α - параметрам, определяющие составы исходных бинарных растворов, использованных для приготовления расплавов рассматриваемых лучевых сечений $a_i - C$, $v_i - C$, $c_i - C$ трехкомпонентной системы $A-B-C$.

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

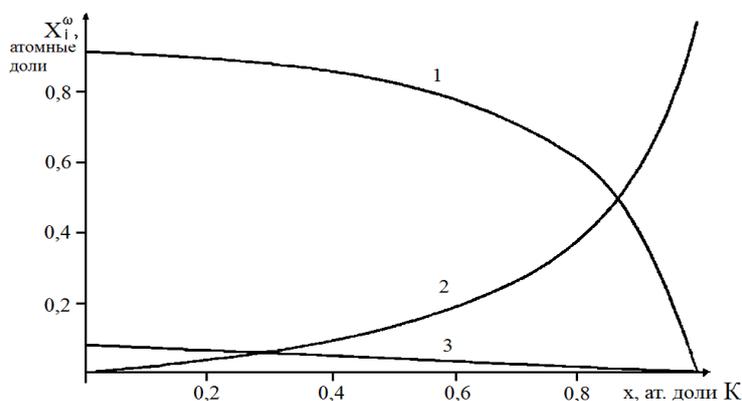


Рисунок 8 – Зависимость состава поверхностного слоя расплавов направления разреза $Na:Cs(1:11)+K$ от содержания калия в объеме раствора: 1- Cs; 2-K; 3-Na, вычисленные по формулам (24)-(26).

3. Методика прогнозирования 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 литературы,. Затем готовят два расплава 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^ω , x_B^ω , $\Gamma_A^{(N)}(x)$, $\Gamma_B^{(N)}(x)$ и других параметров для любых составов поверхностей расплавов бинарной системы $A-B$.

Такая методика построения изотерм ПН и определения состава поверхностного слоя и адсорбций компонентов позволяет значительно 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.

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 расплавов тройных систем.

Предлагаемая методика заключается в следующем. Выбираем 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) измеряем ПН каждого из них. Имея эти данные по методике (см. гл. II), составляем уравнение типа (6) 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).

Далее выбираем на стороне $A-C$ треугольника ABC два расплава с составами x_1 и x_2 ($x_1, x_2 = x$ – концентраций добавляемого (второго) компонента рассматриваемой бинарной системы). Введем обозначения $x_1/(1-x_1) = b_1$ и $x_2/(1-x_2) = b_2$, которые 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 l 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 с составами x_1 и x_2 , соответствующих точкам $c_1 = x_1/(1-x_1)$ и $c_2 = x_2/(1-x_2)$. 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:

$$(30) \quad \left. \begin{array}{l} x_{A5} + x_{B5} + x_{C5} = 1 \\ x_{A5} / x_{B5} = c_1 \\ x_{A5} / x_{C5} = b_1 \end{array} \right\} ; \quad \left. \begin{array}{l} x_{A5} = \frac{c_1 b_1}{c_1 + b_1 + c_1 b_1} \\ x_{B5} = \frac{b_1}{c_1 + b_1 + c_1 b_1} \\ x_{C5} = \frac{c_1}{c_1 + b_1 + c_1 b_1} \end{array} \right\} ; (31) \quad \left. \begin{array}{l} x_{A8} = \frac{c_1 b_2}{c_1 + b_2 + c_1 b_2} \\ x_{B8} = \frac{b_2}{c_1 + b_2 + c_1 b_2} \\ x_{C8} = \frac{c_1}{c_1 + b_2 + c_1 b_2} \end{array} \right\} ; (32)$$

Из решения системы (30) найдем значения x_{A5} , x_{B5} и x_{C5} для точки 5 (рис. 7) по (31). По такой же схеме можем вычислить концентрации x_{A8} , x_{B8} и x_{C8} компонентов A , B и C в точке 8 по (32).

Подставляя значения x_{A5} , x_{B5} , x_{C5} и x_{A8} , x_{B8} , x_{C8} в (28) и (29), 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 $C-c_1$:

$$\sigma_{C-c_1}(x) = \beta_{C-c_1} \frac{(F_{C-c_1} - 1)(1-x)x}{1 + (F_{C-c_1} - 1)x} + \sigma_{B_1}(1-x) + \sigma_c x \quad (33)$$

$$\sigma_{C-c_2}(x) = \beta_{C-c_2} \frac{(F_{C-c_2} - 1)(1-x)x}{1 + (F_{C-c_2} - 1)x} + \sigma_{B_2}(1-x) + \sigma_c x \quad (34)$$

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

Направления разрезов $C-c_1$ и $C-c_2$ нами были выбраны 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 расчетов 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	$\sigma(x_2)$	$\beta_1, мН/м$	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 в сравнении с данными экспериментов 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

На рис.9 представлены полученные результаты для выбранных направлений лучевых разрезов системы $Na-K-Cs$.

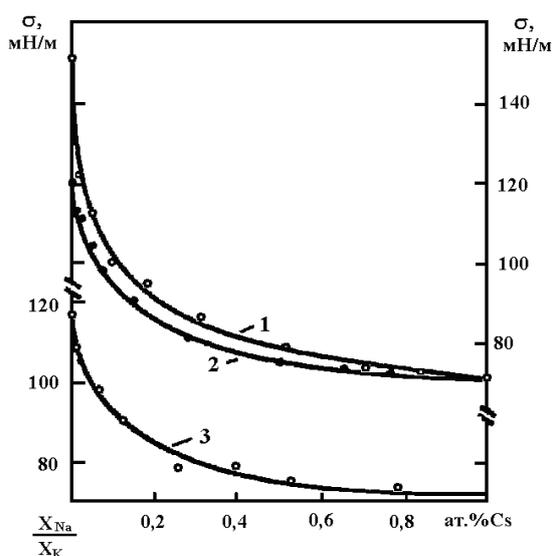


Рисунок 9 – Сравнение результатов наших расчетов изотерм ПН трехкомпонентных сплавов (сплошные линии), полученные по разработанной методике с данными экспериментов [2] (точки) (1 – c_1 - Cs; 2 – c_2 - Cs; 3 – c_3 - Cs).

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 успешно использовать для прогнозирования свойств поверхности трехкомпонентных расплавов любых выбранных сечений.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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 известных);
- 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 соединений типа A_nB_m , квазимолекулярных образований: кластеров, группировок атомов и т.п, устойчивых при температурах измерений ПН.

2. Отклонение экспериментальной изотермы ПН ($\sigma(x)$) от изотермы ПН идеальной системы $\sigma_{ид}(x)$, равное $\Delta\sigma(x)$, является важным параметром поверхности реального раствора, характеризующим характер взаимодействия компонентов системы. Величину $\Delta\sigma(x)$ следует определить относительно аддитивной прямой $\sigma_{ад}(x)$.

3. Главной причиной изменения ПН ($\Delta\sigma(x)$) свежееобразованной поверхности расплава является процесс перераспределения компонентов расплава, обусловленный переходом

неравновесной в начале системы поверхностный слой-объем расплава в равновесное состояние с минимумом свободной энергии всей системы.

4. Изменение ПН свежесформированной поверхности бинарного расплава данного состава при его переходе из начального неравновесного состояния поверхности расплава в равновесное состояние ($\Delta\sigma(x)$) пропорционально изменению содержания поверхностно активного компонента (Δx^o) в поверхностном слое расплава того же состава.

5. Для бинарных систем с монотонным изменением ПН (для изотерм группы (а), см. п1) установлена аналитическая зависимость ($\sigma(x)$) между ПН (σ) расплава и его составом (x). Разработана методика определения параметров β и F выражения $\sigma(x)$, позволившая определить из данных экспериментов важнейший параметр поверхности расплава F — константу адсорбционного равновесия. Показано, что предложенное выражение $\sigma(x)$ позволяет описать монотонно меняющиеся изотермы ПН бинарных и трехкомпонентных систем с высокой точностью во всей области составов. Допускаемая относительная погрешность в среднем около 1%.

6. Предложенная аналитическая зависимость ПН от состава расплава $\sigma(x)$ позволяет вычислить величину $(d\sigma/dx)_{p,T}$, обходя малопродуктивную и недостаточно точную методику графического (ручного) дифференцирования изотермы ПН и адсорбции компонентов расплава. Показано, что предложенное уравнение изотермы ПН позволяет значительно уменьшить ошибки (с 15% до 1%), допускаемые при вычислениях адсорбции компонентов и состава поверхностного слоя расплава традиционным способом. Установлено, 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 $\beta(F-1)$ зависит характер адсорбций добавляемого компонента.

7. Предложены методики построения изотерм ПН, адсорбций $\Gamma_i^N(x)$, состава поверхностного слоя расплавов x_i^o двухкомпонентных систем во всей концентрационной области с использованием экспериментальных значений ПН чистых компонентов и всего лишь двух расплавов разных составов. Показано, что предложенный метод расчета поверхностных свойств расплавов бинарных систем можно успешно применить и к трехкомпонентным системам.

8. На основе полученных выражений изотерм ПН ($\sigma(x)$) двух и трехкомпонентных систем, 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.

9. 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.

Цитируемая литература:

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.

Список работ, опубликованных автором по теме диссертации

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.

19. Калажоков З.Х. Аналитическое описание экспериментальных изотерм поверхностного натяжения бинарных систем с широким минимумом. / З.Х. Калажоков, К.В. Зихова, Л.Х. Мусова, Х.Х. Калажоков // Университетский научный сборник №2. Сборник научных трудов национальной университетской научно-практической конференции, приуроченной к 85-летию со дня основания Кабардино-Балкарского государственного университета. – Нальчик: КБГУ, 2018г. – С. 23-26.