

Комкова Дарья Аркадьевна

«Изотермическое уравнение состояния: бесконечный бездефектный кристалл без внутренних напряжений или наноструктурированный поликристалл с микродеформациями второго рода?»

Цели и задачи проекта:

Цель проекта: показать, что ключевой негласный постулат всех теоретических моделей для изотермического уравнения состояния («equation of state» (EOS)) – предположение, что описываемое вещество представляет из себя идеальный кристалл, не имеющий микронапряжений второго рода во всем диапазоне давлений – является простым теоретическим допущением, которое приводит к ошибочным трактовкам экспериментальных данных, полученных разными группами.

Для достижения данной цели предлагается решить **следующие задачи:**

1. Провести анализ Вильямсона-Холла для рентгеновских данных, полученных для сверхсжатого золота в диапазоне 11-500 ГПа. Данная задача включает: систематизацию и обработку данных, определение положения рентгеновских рефлексов и их интегральной ширины, нахождение параметров функции инструментального уширения приборов.
2. Определить зависимость от давления размера микрокристаллитов $D(P)$ и микронапряжений второго рода (P) в сверхсжатом золоте, проанализировать полученные результаты.
3. Подготовить и отправить материалы для публикации в журнале из Белого списка, выступить с докладом на конференции, подготовить и защитить отчет в рамках молодежной научной сессии ИФМ УрО РАН 2026.

Ожидаемые результаты:

1. Установлена зависимость «размер кристаллов – микронапряжения второго рода» от давления для золота в диапазоне давлений до 0,5 ТПа.
2. Сформулирована и обоснована актуальная задача по изменению базовой модели изотермического уравнения состояния, которая должна рассматривать описываемое вещество не как идеальное тело, а включать размер кристаллитов и микронапряжения второго рода как дополнительные параметры.
3. Отправлена в журнал или опубликована статья в журнале из Белого списка, представлен устный доклад на конференции, подготовлен и представлен отчет о проделанной работе на молодежной научной сессии ИФМ УрО РАН в 2026 г.

Методическая ценность состоит в предложении расширенного анализа данных по сверхсжатым материалам, для которых ранее были определены параметры уравнений состояния, с учетом изменения структурных параметров.