

dc_843_14

MTA Doktori értekezés tézisei

Stabilitás és fázisátmenetek kondenzált anyagokban

Imre Attila



MTA Energiatudományi Kutatóközpont

Budapest

2014

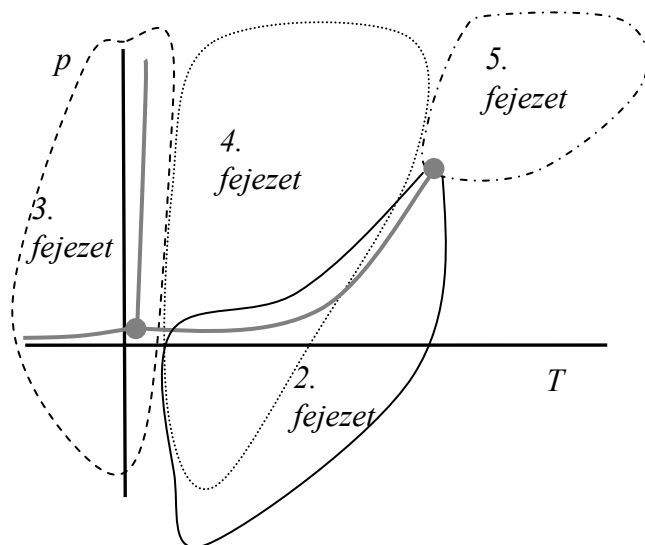
Bevezetés, célkitűzések

A mindennapi életben általában olyan anyagokkal találkozunk, amelyek a nyomásuknak és hőmérsékletüknek megfelelő stabil szilárd, folyadék vagy gáz halmazállapotban vannak. Ritkábban találkozhatunk olyan anyagokkal, amelyek nem a stabil fázisukban vannak, ilyenek pl. az üvegek (túlhűtött folyadékok), a ködkamrákban használt túlhűtött gőz, vagy a túlhevített folyadék. A legismertebb folyadékunk a víz; stabil állapotában atmoszférikus nyomáson $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ alatt szilárd jég, $0\text{--}100\text{ }^{\circ}\text{C}$ között folyadék, $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ felett légnemű gőz. Kevésbé köztudott, hogy – ugyancsak atmoszférikus nyomáson – a tiszta víz lehűtve $-42\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ig, míg a másik irányban kb. $+300\text{ }^{\circ}\text{C}$ -ig cseppfolyós maradhat. Ezek a túlhűtött vagy túlhevített állapotok nemcsak a hőmérséklet, hanem a nyomás változtatásával is elérhetők; a nyomás ilyenkor gyakran vesz fel abszolút negatív értéket. A -40 és $0\text{ }^{\circ}\text{C}$, valamint a 100 és $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ közötti folyadék-állapotok metastabilak; ezekből a folyadék akár külső hatásra, akár spontán módon stabil állapotba relaxálódhat, azaz hirtelen megfagyhat vagy elforrhat. A metastabil állapotok egységes kezelése nehézkes, ugyanis míg a túlhűtésnél a rendezetlen (folyadék) rendszer egy rendezett (szilárd) állapotra nézve metastabil, addig túlhevítésnél mind a metastabil, mind a stabil rendszer rendezetlen (folyadék és gőz/gáz); a dolgozat az utóbbi állapotokkal és egyes, hozzájuk kötődő állapotokkal/jelenségekkel foglalkozik.

A dolgozatomban a nyomáscsökkentéssel „túlhevített” metastabil folyadékok tulajdonságaival, egyes fázisátmenetek stabil tartományból a metastabil tartományba való kiterjeszthetőségével, a stabilitási határok meghatározhatóságával és az ezekkel matematikailag és fizikailag rokonítható, a szuperkritikus tartományban elhelyezkedő Widom-vonalak jelentőségével és leírásával foglalkoztam. A kutatások négy nagyobb csoportra bonthatók, ezekkel a csoportokkal a dolgozat egy-egy fejezete foglalkozik. A kutatási „területek” a hőmérséklet-nyomás diagram egy-egy részét fedik le; az alábbi ábrára tekintve láthatjuk, hogyan alkotnak az egyes részkutatások egy egységes egészet.

A dolgozatban elsőként a tiszta, egykomponensű folyadékok folyadék-gőz fázisátmenetre vonatkozó stabilitásával foglalkoztam (2. fejezet). A stabil folyadékfázisból melegítéssel vagy a nyomás csökkentésével (izotróp húzással) az adott hőmérséklethez tartozó egyensúlyi gőznyomást elérve a folyadék nem szükségszerűen forr fel; megmaradhat metastabil folyadék állapotban. A metastabil régió a hőmérséklet-nyomás síkon véges

kiterjedésű, azaz a hőmérséklet nem növelhető egy bizonyos határ fölé; ugyanígy a nyomás sem csökkenthető egy bizonyos határ alá. Ez a termodinamikai stabilitási határ a hőmérséklet-



A kutatási területeknek megfelelő fejezetek „elhelyezkedése” a hőmérséklet-nyomás síkban. A szürke vonalak és pontok egy sematikus fázisdiagramot ábrázolnak (gőznyomásgörbe, hármas-pont, szublimációs görbe, olvadáspont-görbe, kritikus pont).

nyomás síkon egy görbe, az úgynevezett spinodális. A stabilitási határ pontos helye kimérhetetlen, mert még elérése előtt egyéb folyamatok (a homogén vagy heterogén buborék-nukleáció) megszünteti a metastabil folyadék-állapotot. Ezért kidolgoztunk egy módszert, ami a folyadék-gőz határréteg esetenként mérhető (felületi feszültség, határfelület-vastagság), gyakrabban csak számítható (határfelület-beli tangenciális nyomásprofil) tulajdonságaiból képes a stabilitási határok helyének becslésére a nyomás-hőmérséklet síkon. A módszert modell-rendszereken teszteltük (Lennard-Jones argon, Shan-Chen fluidum), majd az itt kapott pozitív eredmények után különböző folyadékok stabilitási határait számítottuk ki vele (hélium-4, *n*-nonán, széndioxid, víz). A határok helyének ismeretében kiválaszthattuk a vízre használatos állapotegyenletek közül azokat, amelyek ezekenek a határoknak az elhelyezkedését pontosan adják meg. Ezekről az állapotegyenletekről feltételezhető, hogy jól írják le a metastabil (túlhevített) folyadékok viselkedését. Az így kiválasztott állapotegyenletekkel kiszámoltuk néhány, nukleáris energetikában fontos túlhevítéses baleset-típusra a balesetkor felszabaduló energia maximumát.

A következő lépésben továbbra is tiszta folyadékoknál maradva megvizsgáltuk egyes átmeneteket jellemző görbék nyomás-hőmérséklet sík-beli kiterjeszhetőségét a metastabil folyadéktartományba (3. fejezet). Ezek az átmenetek a szilárd/folyadék fázisátmenetet jellemző olvadáspont/fagyáspont görbe, a folyadékkristályoknál megfigyelhető izotróp-nematikus fázisátalakulást leíró görbe, illetve az egyes folyadékok üvegesedését jellemző

üvegesedési görbe. A metastabil régió mellett a görbék stabil folyadékregió-beli, sok esetben nagyon nagy nyomású részeit is tanulmányoztuk. Mivel az ilyen átmeneteknél már nemcsak fluidumok, de rendezett állapotok is szerepeltek, így szükséges volt, hogy – ha nem is teljesen kimerítően - a szilárd anyagok izotróp húzásra vonatkozó stabilitási határait is megvizsgáljuk (ez az állapot a folyadékoknál megfigyelhető nehatív nyomásnak felel meg).

Ezután a két- vagy többkomponensű folyadékokban fellépő folyadék-folyadék fázisátmenet nyomásfüggésével kapcsolatos eredményeket mutattam be (4. fejezet). Ekkor a kezdetben homogén (egyfázisú) keverék hőmérséklet és/vagy nyomásváltoztatás hatására két, különböző összetételű folyadékfázisra esik szét. Az egyik cél itt is a metastabil tartományba való kiterjeszthetőség vizsgálata volt, de ehhez egyrészt ki kellett dolgoznunk több olyan módszert is, amely ebben a tartományban képes detektálni a vizsgált fázisátmenetet, másrészt – az általános leíráshoz – meg kellett vizsgálnunk a fázisátmenet viselkedését a stabil fázisoknak megfelelő nyomástartományban is. A vizsgált anyagok láncmolekulák, leggyakrabban polimerek voltak, így ugyanis a lánc hossz változtatásával kontroláltan és majdnem folyamatosan lehetett változtatni a fázisátmeneti görbék hőmérséklet-nyomás síkbeli helyét. A polimerek használatának köszönhetően a kutatás „melléktermékeként” érdekes összefüggésekre bukkantunk, amelyek jól felhasználhatók polimer oldhatósági és polimer-polimer elegyedési problémák leírásánál.

Végezetül a szuperkritikus víz viselkedését vizsgáltuk a stabilitási határokkal fizikailag és matematikailag is rokonítható Widom-vonalak környékén (5. fejezet). A szuperkritikus víz az úgynevezett negyedik generációs atomreaktorok egyik típusának (SCWR, SuperCritical Water-cooled Reactor, szuperkritikus vízhűtésű reaktor) ígéretes hűtőközege. A kutatások célja az volt, hogy megvizsgáljuk a szuperkritikus állapotban levő víz alkalmazhatóságát erre a feladatra, valamint hogy a Widom-vonalak környékén fellépő anomáliák milyen speciális problémákat okozhatnak a hűtőközegkénti alkalmazásban.

A hatodik fejezetben a dolgozat rövid összefoglalója, a tizenhat tézispont, valamint az eredmények felhasználhatóságának leírása található.

A dolgozathoz tartozik két Függelék is. Az első a dolgozatban talán leggyakrabban szerepet kapó metastabil állapot, a negatív nyomású állapot előállításával foglalkozik. A második függelék a felhasznált állapotegyenletek és a dolgozatban előforduló rövidítések jegyzéke.

Új tudományos eredmények

Az értekezésben bemutatott új tudományos eredményeim tizenhat tézispontban foglalhatók össze.

A folyadék-gőz és gőz-folyadék stabilitási határok vizsgálatára vonatkozó tézispontok:

1. Megmutattuk, hogy a stabil régiókban pontos eredményeket adó állapotegyenletek hibás eredményeket adhatnak a metastabil állapotokban, ezért szükség van egy módszerre, amely ezeknek az állapotegyenleteknek a megfelelőségét teszteli, valamely fontos jellemző, pl. a stabilitási határok független kiszámításával. Ennek okán kidolgoztunk egy módszert, amelynek használatával a stabil folyadék-gőz határfelületben levő nyomástenzor úgynevezett tangenciális komponensének extrémumaiból kiszámítható a folyadék-gőz és – kisebb pontossággal - a gőz-folyadék spinodális (Imre és tsai. 2008c, Imre és Kraska 2009, Imre 2013b, Imre és tsai. 2013).
2. A fenti módszer helyességét több modellrendszeren (Lennard-Jones argon és Shan-Chen fluid) ellenőriztük, majd – meggyőződve arról, hogy ezeknél a rendszereknél helyes eredményt ad – kiszámítottuk a széndioxid, *n*-nonán és víz stabilitási határait. Ezekre az eredményekre támaszkodva kiválasztottuk azokat az állapotegyenleteket, amelyek képesek az általunk kiszámított spinodálisokat visszaadni és így feltehetően pontosan írják le a metastabil állapotú folyadékok egyes tulajdonságait (Imre és tsai. 2008c, Kraska és tsai. 2009a, Braun és tsai. 2013, Imre és tsai. 2013).
3. Az így kiválasztott állapotegyenletekkel kiszámítottuk a túlhevített víz robbanás-szerű forrásakor felszabaduló energiákat néhány, a paksi atomerőműnél releváns esetre (Imre 2013b).
4. Bizonyos közelítéseket alkalmazva a módszert képes arra, hogy a folyadék-gőz spinodális ki lehessen vele számítani, kizárólag mérhető mennyiségekből (folyadék-gőz felületi feszültség, határréteg vastagság); a módszert a hélium-4 spinodálisának kiszámításával teszteltük (Imre és Kraska 2008).

Az egyszerű fluidumoknál rendezettebb anyagok vizsgálatára vonatkozó tézispontok:

5. Megmutattuk, hogy bár a folyadékoknál alkalmazott stabilitási kritériumok nem alkalmazhatók egy az egyben a szilárd anyagokra, mindazonáltal a szilárd anyagok

törése, szakítása sok esetben rokonítható a folyadékokbeli heterogén vagy homogén nukleációval (Imre és tsai. 2008a, Imre és tsai. 2008b)

6. Az üvegesedési nyomás és hőmérséklet meghatározására bevezettünk két félempírikus egyenletet, amelyekkel a nyomás-hőmérséklet síkbeli üvegesedési görbén kívül a vizsgált folyadék stabilitási határa is megbecsülhető. Egy új félempírikus egyenletet javasoltunk, amely képes leírni a nyomás-hőmérséklet térbeli üvegesedési, izotróp-nematikus és olvadáspont-görbéket még olyan esetekben is, amelyekben ezek anomálishan viselkednek, valamint kiterjeszthető $p < 0$ nyomásokra is (folyadék-kristályoknál a kiterjeszthetőséget kísérlettel is demonstráltuk) (Drozd-Rzoska és tsai. 2007a, Drozd-Rzoska és tsai. 2007b, Drozd-Rzoska és tsai. 2008)
7. A fenti egyenlet segítségével megmutattuk, hogy egyes anyagoknál az olvadáspont-görbéken talált „törés” nem mindig valós, így nem feltétlenül jelzi egy második folyadékfázis létét (Imre és Rzoska 2010).

A folyadék-folyadék fázisátmenetek vizsgálatára vonatkozó tézispontok:

8. Kidolgoztunk olyan kísérleti módszereket, amelyekkel közvetve vagy közvetlenül mérhető a két- vagy többkomponensű folyadékokban fellépő folyadék-folyadék fázisátmenet olyan esetekben is, amikor a folyadék már metastabil a folyadék-gőz fázisátmenetre (túlhevített vagy negatív nyomású). (Imre és Van Hook 1994, Imre és Van Hook 1997, Imre és Van Hook 1998a, Drozd-Rzoska és tsai. 2004, Drozd-Rzoska és tsai. 2007c, Kraska és tsai. 2009b)
9. Megmutattuk, hogy a hőmérséklet-nyomás síkon a korábban gyakran két független keveredési görbeként kezelt alsó és felső kritikus elegyedési hőmérséklet (UCST és LCST) valójában egy görbe lehet; gyakran $p < 0$ nyomáson egyesülnek egy kettős kritikus pontban és ez a pont mindig felette van az illető keverékhez tartozó folyadék-gőz stabilitási határnak (Imre és Van Hook 1994, Imre és Van Hook 1997, Imre és Kraska 2005, Kraska és tsai. 2009b)
10. Megmutattuk, hogy polisztirol/oldószer (vagy általánosabban, gyengén kölcsönható polimer/oldószer) rendszereknél az elegyedés nyomásfüggése leírható egy mestergörbével (Imre és tsai. 1999a, Imre és tsai. 1999b, Imre és tsai. 2003b).
11. Megmutattuk, hogy a nyomás hatására az oldószerek a korábban használt gyenge és theta kategóriák határát átléphetik; kidolgoztunk egy empírikus módszert, amely ezt figyelembe véve képes leírni az UCST és LCST moltömeg-függését; ennek a

leírásnak a paraméterei korrelálhatók a Hansen-féle oldhatósági paraméterekkel (Imre és Van Hook 1996a, Imre és Van Hook 1996b, Imre és Van Hook 1997).

12. Megmutattuk, hogy nem elegyedő polidiszperz polimer/polimer pároknál a koncentráció-nyomás térben előfordulnak elegyedési szigetek (Imre és tsai. 2002a, Imre 2003a), ezek segítségével látszólag nem elegyedő polimer-párok keveréke is homogenizálható lehetne.

A superkritikus víz vizsgálatára vonatkozó tézispontok:

13. Megállapítottuk, hogy a superkritikus tartományban különböző fizikai-kémiai mennyiségeknek nem ugyanazon a hőmérsékleten és nyomáson lesz anomális a viselkedésük, így a hőmérséklet-nyomás síkban nem egy Widom-vonal, hanem Widom-vonalak sokasága, illetve egy, az általuk lefedett Widom-régió létezik. A termohidraulikai (hő- és áramlástan) szempontból fontos mennyiségekhez tartozó Widom-vonalakat feltérképeztük. Az anomáliák a kritikus ponttól távolodva csökkennek, kb. 50 MPa nyomás környékén a hatásuk az észlelhetőség alá csökken (Imre és tsai. 2012).
14. Megállapítottuk, hogy a nukleáris energetikában használt egyes hő- és áramlástan számítások superkritikus régió-beli pontosságcsökkenésének egyik fontos oka egyes mennyiségek (pl. izoterm kompresszibilitás, izobár hőkapacitás) anomálishan gyors változása. Kidolgoztunk egy módszert, amely egyes, széles körben használt termohidraulikai kódok esetében a pontosságot a megkívánt szintre tudja növelni (Imre és Tiselj 2012).
15. Megállapítottuk, hogy a Widom-vonalak helyzete és a környékükön lévő anomáliák nagysága már kismértékű szennyeződésre is nagyon érzékeny. A termohidraulikai számítások pontosságát már olyan kis koncentrációjú szennyeződés is befolyásolhatja amekkora előfordulhat az egyébként nagyon nehezen oldódó korróziós termékek beoldódása miatt (Imre és tsai. 2011).
16. Megmutattuk, hogy egy superkritikus vízes hűtőkörben nyomáseséssel járó balesetek hatására a kör különböző részein, egyidejű hirtelen kondenzáció (vízítés) és robbanás-szerű forrás következhet be; az ezek által keltett lökés-hullámok tovább roncsolhatják a már eleve sérült csöveket (Imre és tsai. 2010a).

Az eredmények hasznosíthatósága

Azon szerencsés helyzetben vagyok, hogy a négyből három fejezetnél a bemutatott kutatásaim már eljutottak az eredmények hasznosíthatóságáig, vagy épp csak pár lépésre vannak tőle. A stabilitási határok és a metastabil folyadékok vizsgálata – a bemutatott vizes példa mellett – más, nagy nyomáson és magas hőmérsékletén tárolt folyadékokkal kapcsolatos biztonsági számításoknál is fontos lehet. Nagy nyomású üvegesedési vagy olvadási/fagyási folyamatok leírására sok területen van szükség, bár ezekre a dolgozatban nem tértem ki. A kétkomponensű vizsgálatoknál a polimer-keverékek nyomás-térbeli kompatibilitási szigetei, illetve a kibővített moltömegfüggés-leíró módszer lehet talán a legközvetlenebbül felhasználható. A szuperkritikus rész hasznosíthatóságát kell legkevésbé magyarázni; a kutatások egy, már tervezési fázisban levő reaktorípus biztonsági problémáival foglalkoztak.

Köszönetnyilvánítás

Kutatásaim jelentős részét nem egyedül végeztem. Ezúton is szeretném megköszönni az elmúlt húsz évben velem együtt dolgozó kollegáimnak a segítségét. Az összes nevet hosszadalmas lenne felsorolni – többségük társszerzőként szerepel a publikációkon – de ki kell emelnem három kutatót, akik nélkül az itt ismertetett munka nem jöhetett volna létre: Alexander Van Hook-ot (University of Tennessee, Knoxville, USA), akinél poszt-doktorként először foglalkoztam metastabil folyadékokkal, valamint a két „legtermékenyebb” társszerzőmet, Thomas Kraskát (Universität zu Köln, Németország) és Sylwester J. Rzoskát (Uniwersytet Śląski, Katowice és UNIPRESS, Varsó, Lengyelország). Ugyancsak szeretném köszönetemet kifejezni az AEKI, később EK vezetőinek (Gadó János és Horváth Ákos), akik lehetővé tették, hogy ezzel az atomenergetikát csak részben átfedő témával foglalkozzak. Köszönet illeti még kollegáimat, Schiller Róbertet és Jancsó Gábort, valamint Pálinkás Gábor akadémikust a dolgozat kéziratának kritikus átolvasásáért.

Végezetül szeretném megköszönni családom biztatását – bár az itt felsoroltak közül ők értik legkevésbé a dolgozatban leírtakat, az mégis leginkább miattuk íródott meg.

Hivatkozások¹

A dolgozat alapját harminc folyóirat-cikk, egy konferencia-kiadványban megjelent cikk és egy jelentés képezik.

A tézisek alapjait képező saját publikációk

- Braun, S.; Imre, A.R.; Kraska, T.: Stability limits of n-nonane calculated from molecular dynamics interface simulations, *Journal of Chemical Physics*, 138(2013)244710
- Drozd-Rzoska, A., Rzoska, S.J., Imre, A.R.: Liquid-liquid phase equilibria in nitrobenzene-hexane critical mixture under negative pressure, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 6(2004)2291-2294.
- Drozd-Rzoska, A., Rzoska, S.J., Paluch, M., Imre, A.R., Roland, C.N.: On the glass temperature under extreme pressures, *Journal of Chemical Physics*, 126(2007a)164504
- Drozd-Rzoska, A., Rzoska, S.J., Imre, A.R.: On the pressure evolution of the melting temperature and the glass temperature, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 353(2007b)3915-3923
- Drozd-Rzoska, A., Rzoska, S.J., Paluch, M., Imre, A.R.: Critical behaviour in nitrobenzene-hexane mixture by approaching the liquid-liquid critical line, *Fluid Phase Equilibria*, 255(2007c)11-16
- Drozd-Rzoska, A., Rzoska, S.J., Roland, C.M., Imre, A.R.: On the pressure evolution of dynamic properties in supercooled liquids, *Journal of Physics: Condensed Matter* 20(2008)244103
- Imre, A., Van Hook, W.A.: Polymer-Solvent Demixing Under Tension. Isotope and Pressure Effects on Liquid-Liquid Transitions. VII. Propionitrile-Polystyrene Solutions at Negative Pressure, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 32(1994)2283-2287.
- Imre, A., Van Hook, W.A.: Liquid-liquid demixing from solutions of polystyrene. 1. A review. 2. Improved correlation with solvent properties. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 25(1996a)637-661(Erratum: 25(1996b)1277)
- Imre, A., Van Hook, W.A.: Demixing in polystyrene/methylcyclohexane solutions, *Journal of Polymer Science B, Polymer Physics Ed.*, 34(1996b)751-760.
- Imre, A., Van Hook, W.A.: Continuity of solvent quality in polymer solutions. Poor solvent to theta-solvent continuity in some polystyrene solution, *Journal of Polymer Science B, Polymer Physics Ed.* 35(1997)1251-1259.
- Imre, A., Van Hook, W.A.: Liquid-liquid equilibria in polymer solutions at negative pressure, *Chemical Society Review*, 27(1998a)117-123.

¹ A rendezés elsődleges szempontja az első szerző neve, másodlagos szempontja a megjelenés éve volt. Ahol ezek megegyeznek, az évszám mögé írt betűvel különböztetem meg a publikációkat.

- Imre, A.R., Melnichenko, G., Van Hook, W.A.: Liquid-liquid equilibria in polystyrene solutions: the general pressure dependence, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 1(1999a)4287-4292
- Imre, A.R., Melnichenko, G., Van Hook, W.A.: A polymer-solvent system with two homogeneous double critical points: polystyrene(PS)/(n-heptane+methylcyclohexane), *Journal of Polymer Science B, Polymer Physics Ed.*, 37(1999b)2747-2753.
- Imre, A.R., Melnichenko, G., Van Hook, W.A., Wolf, B.A.: On the effect of pressure on the phase separation of polymer blends and polymer solutions: oligostyrene/n-alkane systems, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 3(2001)1063-1066 (erratum: 3(2001)2190).
- Imre, A.R., Kraska, T., Yelash, L.V.: The effect of pressure on the liquid-liquid phase equilibrium of two polydisperse polyalkylsiloxane blends, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 4(2002a)992-1001
- Imre, A.R.: Solubility islands for polymer blends - A new option to homogenize incompatible polymers? *Macromolecular Symposia*, 198(2003a)11-18.
- Imre, A.R., Kraska, T.: Stability limits in binary fluid mixtures, *Journal of Chemical Physics*, 122(2005)064507.
- Imre, A.R., Drozd-Rzoska, A., Horváth, Á., Kraska, T., Rzoska, S.J.: Solid-fluid phase transitions under extreme pressures including negative ones, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 354(2008a)4157-4162.
- Imre, A.R., Drozd-Rzoska, A., Kraska, T., Rzoska, S.J., Wojciechowski, K.W.: Spinodal strength of liquids, solids and glasses, *Journal of Physics: Condensed Matter* 20(2008b)244104.
- Imre, A.R., Kraska, T.: Liquid-vapour spinodal of pure helium-4, *Physica B*, 403(2008)3663-3666.
- Imre, A.R., Mayer, G.; Házi, G.; Rozas, R.; Kraska, T.: Estimation of the liquid-vapor spinodal from interfacial properties obtained from molecular dynamics and lattice Boltzmann simulations, *Journal of Chemical Physics*, 128(2008c)114708.
- Imre, A.R., Kraska, T.: Estimation of spinodals from the density profile of the vapor-liquid interface, *Fluid Phase Equilibria*, 284(2009)31-37.
- Imre, A.R.; Barna, I.F.; Ézsöl, G.; Házi, G.; Kraska, T.: Theoretical study of flashing and water hammer in supercritical water cycle during pressure drop, *Nuclear Engineering and Design*, 240(2010a)1569–1574.
- Imre, A.R., Rzoska, S.J.: High-pressure melting curves and liquid-liquid phase transition, *Advanced Science Letters*, 3(2010a)527-530.
- Imre, A.R.; Házi, G.; Horváth, Á.; Maráczy, C.; Mazur, V.; Artemenko, S.: The effect of low-concentration inorganic materials on the behaviour of supercritical water, *Nuclear Engineering and Design*, 241(2011a)296-300.
- Imre, A.R.; Tiselj, I.: Reduction of fluid property errors of various thermohydraulic codes for supercritical water systems, *Kerntechnik*, (2012)18-24.
- Imre, A.R.; Deiters, U.K.; Kraska, T.; Tiselj, I.: The pseudocritical regions for supercritical water, *Nuclear Engineering & Design*, 252(2012)179-183.

dc_843_14

- Imre, A.R.: Stability and negative pressure in bulk and confined liquids, NATO Science Series, Alternative Water Resources in Arid Areas by retrieving Water from Secondary Sources (Eds.: L. Mercury, N. Tas and M. Zilberbrand), Springer, pp151-157 (2013a).
- Imre, A.R., A. Baranyai, U. Deiters, P.T. Kiss, T. Kraska, S. E. Quiñones Cisneros: Estimation of the Thermodynamic Limit of Overheating for Bulk Water from Interfacial Properties, International Journal of Thermophysics, 34(2013)2053–2064.
- Kraska, T., F. Römer, A. R. Imre: The relation of interface properties and bulk phase stability: MD simulations of carbon dioxide, Journal of Physical Chemistry B, 113(2009)4688-4697.
- Kraska, T., Imre, A.R., Rzoska, S.J.: Miscibility holes and continuous liquid-liquid miscibility curves in Types III and IV systems, Journal of Chemical & Engineering Data, 54(2009b)1569-1574,

A tézisek alapjait képező egyéb saját eredmények

- Imre, A.: Energiafelszabadulás túlhevített víz fázisátmenetekor: időbeli lefolyás pontosítása, trajektóriák és energiamegoszlás vizsgálata, jelentés, Országos Atomenergia Hivatal, OAH/NBI-ABA-12/13-M (intézeti nyilvántartási szám: EK-THL-2013-258-01-01) (2013b).

Fontosabb tudományos adatok

(2014. április 14-i állapot az MTMT alapján)

Tudományos közlemények	1996 óta	Összesen
Közlemények SCI referált folyóiratokban	62	68
Ebből egyszerezős közlemény	10	11
Közlemények kongresszusi kiadványban (teljes munka)	14	15
Könyvfejezet	6	6
Szerkesztett könyv	1	1

Összes dolgozat idézettsége (önhivatkozás nélkül)	541
A közlemények összesített hatása	104,3
Hirsch-index	17