

11005
АКАДЕМИЯ НАУК СССР
УРАЛЬСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР
ИНСТИТУТ МЕТАЛЛУРГИИ

**Тезисы научных сообщений VI Всесоюзной
конференции по строению и свойствам
металлических и шлаковых расплавов**

17—19 сентября

Ч. 1. ТЕОРИЯ ЖИДКИХ И АМОΡФНЫХ МЕТАЛЛОВ

Свердловск—1986

Тезисы научных сообщений VI Всесоюзной конференции по
строению и свойствам металлических и шлаковых расплавов.

17-19 сентября.

Ч. I. ТЕОРИЯ ЖИДКИХ И АМОРФНЫХ МЕТАЛЛОВ. Свердловск: УНЦ АН СССР,
1986.

В данных сообщениях освещается состояние и перспективы развития теории жидких и аморфных металлов. Значительное внимание авторы уделяют новейшим версиям метода псевдопотенциала в описании межчастичного взаимодействия в указанных системах, а также принципам построения аналитических и машинных статистических моделей конденсированной металлической фазы. Наряду с традиционной интерпретацией структуры, базирующейся на функциях распределения, широко применяется анализ многогранников.

Приводимые результаты исследований позволяют глубже понять особенности пространственного распределения атомов в аморфных металлах, связь структурных свойств с наблюдаемыми характеристиками. Помещенные в данном сборнике тезисы печатаются по авторским текстам.

Ответственный редактор канд. физ.-мат. наук В.А. Полухин

© УНЦ АН СССР, 1986.

СО Д Е Р Ж А Н И Е

стр

ПОЛУХИН В.А., ВАТОЛИН Н.А. Моделирование структуры и кооперативного атомного движения в жидких и аморфных металлах	3
ПОЛУХИН В.А., БРАТКОВСКИЙ А.М., ВАКС В.Г. Молекулярно-динамическое моделирование стеклования жидкого натрия под давлением 20 Кбар	8
БРАТКОВСКИЙ А.М. К теории плавления щелочных металлов при высоких давлениях	16
ОСТРОВСКИЙ О.И., ГРИЦЕНКО Н.В., БУЗИНИЕР М.А. Расчет структурных и термодинамических характеристик жидкого железа методом Уикса-Чандлера-Андерсона	20
КОВНЕРИСТЫЙ Ю.К., ЛАНДА А.И. Теоретическое исследование структуры, термодинамических и кинетических характеристик ассоциированных расплавов	22
ПОСТОВАЛОВ В.Г., ЯЦЕНКО С.П. Атомные и электронные свойства жидких сплавов непереходных металлов	25
КИСЕЛЕВ А.И., КОНОНЕНКО В.И. Теоретическое исследование парных потенциалов взаимодействия в редкоземельных металлах	28
ИСАИ В.Н. Расчет структурных и термодинамических характеристик расплавов с учетом крутизны парного потенциала взаимодействия	31
КРАСНЫЙ Ю.П., КОЖИНА Л.Н. Теория электропроводности аморфных металлов	33
ЧУДКОВ Е.В., ШИРКАЛОВ Е.Н., ПАВИН В.Е. Сохраняющие норму поведпотенциалы	35
ШВЕЦ В.Т., ОНИЩЕНКО В.П. Межионное взаимодействие в неупорядоченных переходных металлах	39
КУЗЬМИН Л.М. Свободная энергия жидких бинарных сплавов с учетом многочастичных эффектов	43
ЧАЛЫЙ А.В. Особенности термодинамических и корреляционных свойств	

жидких металлов при фазовых превращениях	46
КАКЛОГИН А.С., НОРМАН Г.Э.	
Классические уравнения молекулярного движения с явным учетом квантовых поправок	50
ТРИЦОВ А.Г., КУЩЕНКО В.С.	
Стохастичность и обратимость в молекулярной динамике	52
ЕВСЕЕВ Д.М., СУЛТАНОВ В.Б.	
Стохастическая квантовая динамика как основа для расчета на ЭВМ структуры и термодинамических свойств веществ	56
ВАЛГЕВ А.А., НОРМАН Г.Э., ПОДЛИПЧУК В.Ю.	
Исследование энтропии Крылова-Колмогорова ленард-джой- совских систем методом молекулярной динамики	59
ВОРОНЦОВ-ВЕЛЬЯМИНОВ П.Н., ЛЮБАРЦЕВ А.П.	
Объединенный метод самосогласованного поля - Монте-Карло для расчета равновесного распределения мобильных ионов вблизи заряженных поверхностей в полиионных системах	62
БЕЛЯКОВА Р.М., ПАСТУХОВ Э.А., ВАТОЛИН Н.А.	
Влияние диффузионного движения водорода на структуру же- леза в различных агрегатных состояниях	65
БАЗЫЛЕВ С.В., БАЖЕНОВ А.М.	
Релаксация вязкого потока в ленард-джонсовской системе по данным машинного эксперимента	68
МЕДВЕДЕВ Н.Н.	
К вопросу об икооэдрических и кристаллических координа- циях атомов в простых жидкостях	70
БРАЖКИН В.В., КЕЧИН В.В., ПОМИРЧИ Л.М.	
Расчет бинарной функции металлического стекла типа $Si_{x}M_{1-x}$ методом Монте-Карло	72
ЕВДОКИМЕНКО О.А., ШТЕЙНБЕРГ А.С., БАРБАШ Е.Л., АЛЕХИН В.П.	
Моделирование структуры аморфного и жидкого железа и спла- ва $Fe_{81}V_{19}$ методом Монте-Карло	75
НАБЕРУХИН Ю.И., ВОЛОШИН В.П.	
Собственные структуры конденсированных сред. Машинное мо- делирование ленард-джонсовских систем	78
ГАЛАШЕВ А.Е.	
Устойчивость метастабильных состояний в присутствии вклю- ченных конкурирующей фазы. Молекулярно-динамическая модель простой жидкости и кристалла	81

ПИОТРОВСКАЯ Е.М., БРОДСКАЯ Е.Н. Машинное моделирование пленок	84
ПАВЛОВ В.В. Молекулярная модель реальной жидкости в интервале затвердевания	87
ЛЫСОВ В.И., ХАРЬКОВ Е.И., ГАДЫРА Н.Ф., РЯБЧИКОВ Б.Е. Термодинамические условия стабильности аморфных металлических систем	89
БЕЛАЩЕНКО Д.К. Канонические структуры аморфных металлов	92
КАЦЕНЬСОН А.А. Композиционный ближний порядок в аморфных сплавах. Теория и эксперимент	95
ВОРОБЬЕВ В.И., ПСАХЬЕ С.Г., ПАНИН В.Е. Использование континуальных моделей для описания структуры жидкости и термодинамики фазового перехода типа кристалл-расплав	98
ОЛЕМСКИЙ А.И., ПЕТРУШИН В.А. Микроскопическая теория стеклования жидкости	103
ДОНЦОВ В.И., ВУСИХИС А.С. Особенности плавления и строения расплавленных металлов с позиции теории протекания	106
ВЕДЬЯВ А.В., ГРАНОВСКИЙ А.Б. Электросопротивление аморфных ферромагнитных сплавов	108
ЕВДОКИМЕНКО О.А., КОБЦЕВА М.Б. Расчет плотности состояний аморфных металлических сплавов ..	111
БАТЫРЕВ И.Г., МУШАКОВА Т.И. Плотность электронных состояний и электропроводность аморфных металлических сплавов	116
ГОРБУНОВ В.А. Влияние особенностей ближнего порядка на электронную структуру расплавов аллюминидов $3d$ -переходных металлов подгруппы железа	119
ШУНЯЕВ К.Ю., ТКАЧЕВ Н.К., МЕНЬ А.Н. Влияние размеров комплексов на термодинамические свойства ассоциированной жидкости	122
ЧЕРЕПАНОВА Т.А., НИМРИХТЕР А., ВАЙВОД А.В. Влияние сферически несимметричных взаимодействий на структуру ГЦК - кристаллов с примесью	126
БЕЛАЩЕНКО Д.К. Диффузия по активационному механизму в неупорядоченных системах	127

КРАСНЫЙ Ю.П., КОВАЛЕНКО Н.П., ЦАРЕВ В.Ф. Теория сверхпроводимости простых аморфных металлов	129
КОВАЛЕНКО Н.П., МАХЛАЙЧУК В.Н., ЦАРЕВ В.Ф. О низкотемпературной аномалии теплоемкости металлических стекол	132
МАХЛАЙЧУК В.Н. Температурная зависимость теплопроводности аморфных ме- таллов	134
ЕГОРУШКИН В.Е., МЕЛЬНИКОВА Н.В. О низкотемпературных аномалиях свойств аморфных систем и сплавов	135
ПРИЛЕПО В.Л. Эволюция дефектной структуры и фазовые превращения в аморфных металлах	137
ПРИЛЕПО В.Л., КОНДРАТЬЕВ В.В., БОЛОТОВ И.Е. Количественное описание процесса релаксации квазивакансий в аморфном металле	138
ВАКАРЧУК С.А., ЯКИВИЧУК П.Н., ТКАЧУК В.М., МИГАЛЬ В.М. Исследование фононного спектра аморфных металлов,	139
ВЕНГРЕНОВИЧ Р.Д., ЛОПАТНИК И.А., МИХАЛЬЧЕНКО В.П., КАСИЯН И.М. Особенности кристаллизации аморфных сплавов теллура с ме- таллами III группы	141
БЫКОВ А.М., БОЙКО Ф.А., БОЧКОВАЯ Г.Ю., СУХАРЕВСКИЙ Б.Я. Ян-теллеровский механизм образования реального стекла ...	142
ГЕЛЬЧИНСКИЙ В.Р., РЫСКУЛБЕКОВА Р.М., ШАТМАНОВ Т.Ш. Методика расчета поляризационного вклада в потенциал меж- ионного взаимодействия	144
АНЧАРОВА Л.П., САСОВ А.М. Межионное взаимодействие и особенности электрофизических свойств сплава	147
ЛИТОВСКИЙ В.В., ВАЛИШЕВ М.Г., ЕСИН Ю.О., ПЕТРУШЕВСКИЙ М.С. Расчет термодинамических характеристик бинарных сплавов щелочноземельных металлов с оловом	150
СЫСОВЕВ В.М., ФАХРЕТДИНОВ И.А., ЧАЛЫЙ А.В. Метод производящего функционала в теории корреляционных функций жидких металлов	152
АДХАМОВ А.А., ОДИНАЯВ С. Пространственно-временное поведение бинарной коррелятив- ной функции распределения	154

ЛЫСОВ В.И., ПАВЛУЧЕНКО В.Н., РУДЕНКО А.Г. Закономерности процесса расслоения в жидких бинарных сплавах непереходных металлов	157
ЗОЛЬНИКОВ К.П., ПСАХЬЕ С.Г., ЛАНДА А.И. Влияние давления на термодинамические и кинетические характеристики бинарных сплавов	160
ЮРЬЕВ А.А. Использование первопринципных атомных псевдопотенциалов для вычисления формфакторов и характеристических функций простых металлов	164
ГОРБУНОВ В.А. Корреляция электронной структуры с электрокинетическими свойствами расплавов $Al - Mz$ ($Z = Fe, Co, Ni$)	167
ЕЛИН В.Н. Об ограниченности применения модели Фабера-Займена к расчетам электросопротивления сплавов переходных металлов.....	170
ШВЕЦ В.Т. Влияние обменного взаимодействия S и d электронов на электросопротивление переходных жидких металлов.....	172
КУЗЬМИНА Л.М. Многочастичные взаимодействия в термодинамике упорядочивающихся сплавов.....	175
КАИМ С.Д. О вкладе трехчастичных взаимодействий в коэффициент поверхностного натяжения простых жидких металлов	177
КАИМ С.Д. Псевдопотенциальный расчет температурной зависимости поверхностного натяжения простых жидких металлов	179
КРАВЧУК В.Н. Геометрия поверхности энергии и неоднозначность локальных псевдопотенциалов.....	181
КРАВЧУК В.Н., ЮРЬЕВ А.А. Неоднозначность локальных псевдопотенциалов и электронные свойства жидких металлов.....	183
ПОСТОВАЛОВ В.Г. Унифицированная модель локального псевдопотенциала.....	185
КОБЕЛЕВА Р.М. Влияние неоднозначности псевдопотенциала на величину теплоемкости и энтропии жидких металлов	187
ГРУВЕРМАН С.Л., СУХМАН А.Л. Применение модельных псевдопотенциалов для описания свойств р-коземельных металлов (<i>на Се. УВ</i>).....	189

КИСЕЛЕВ А.И.	
Расчет скорости звука в жидких редкоземельных металлах	192
НОВИКОВ В.Н., КОВАЛЬ Г.М., РЯБЧИКОВ Б.Е.	
Теоретический анализ изотермической сжимаемости, постоянных Грлайзена и кинетической части внутреннего давления жид- ких и твердых аморфных сплавов	193
РУДЕР Д.Д.	
Построение фазовой диаграммы плавления благородных метал- лов методом псевдопотенциала.....	195
КРАШАНИНОВ В.А.	
Использование метода псевдопотенциала для расчета свободной энергии и параметров ближнего порядка в методе вариации кластеров	197
КРИБОБОКОВ В.П., ЯНИН С.Н.	
Изменение потенциалов межатоминого взаимодействия при высоко- интенсивном облучении металла	199
СИДОРОВ Н.И., ЛИСИН В.Л., КОБЕЛЕВА Р.М., ПАСТУХОВ Э.А.	
О точности вычисления парциальных структурных факторов	200
ОСТРОВСКИЙ О.И., АКШИНА Г.Д., ГРИГОРЯН В.А., ЛОПОВ В.М.	
Параметры электронной структуры расплавов железа с бором, фосфором и углеродом	202
РЫЖКОВ И.М., ХАЙМЕНОВ А.П.	
Расчет электронной структуры комплекса $[CrO_4^{2-}]$ в расплавах хлоридов щелочных металлов методом X_{α} -РВ	204
ЛЫЦОВ А.А., ХАЙМЕНОВ А.П.	
Молекулярно-динамическое моделирование влияния давления на свойства расплавленных хлоридов щелочных металлов.....	206
НАУМОВ И.И., ОЛЬХОВНИК Г.А.	
О механизме квазизжидкого течения металлов в условиях "высо- кое давление + сдвиг"	209
ВЛАДИМИРОВ В.М.	
f -группы и тепловая история расплава.....	211
ВАКАРЧУК И.А., МАРГОЛЬЦ И.Ф.,	
Температура Кюри двухкомпонентного аморфного ферромагнетика	213
СОЛОВЬЯН В.Б.	
Базисный учет локализованных состояний в теории металлов.....	214

ЩЕРБАКОВ Л.М., САМСОНОВ В.М.

- Приложения метода равновесных коррелятивных функций к кинетике растекания металлических капель 215
НИЖЕНКО В.И., ХИЛЯ Г.П., ФЛОКА Л.И.
- Термодинамические свойства поверхности металлических расплавов в рамках модели несжимаемого монослоя 217
КИМ З.Б., ПАРТЕНСКИЙ М.Б., СОЛОВЬЕВА Л.М., ФЕЛЬДМАН В.И.
- Эффект смещения электронной обкладки и аномалии емкости двойного электрического слоя на границе металлов с ионными проводниками 219
ВАСИЛЬЧЕНКО А.В., КИМ З.Б., ПАРТЕНСКИЙ М.Б., ФЕЛЬДМАН В.И.
- К самосогласованной теории потенциального барьера на границе металлов с диэлектрической средой: эффект поляризуемости среды в обмене и корреляции 221
МАРТИНК М.М.
- Плотность и поверхностное натяжение жидких металлов 223
ГУШИН А.И.
- Иерархия вероятностных методов статистической физики 224
МАЛЮКОВА Л.В., ГЛАЗОВ М.В.
- Кинетика гомогенной кристаллизации ассоциированных металлических расплавов 226
ШУНЯЕВ К.Ю., ТКАЧЕВ Н.К., МЕНЬ А.И.
- Расчет термодинамических функций смещения жидких сплавов $Pb - Sb$ и $Pd - Cd$ в методе кластерных компонентов 227
ГАЙДУКОВ А.М.
- Знаки скачков термодинамических функций на фазовых границах первого рода многокомпонентных диаграмм состояния 229
ИЛЬНОВ М.И.
- Термодинамические модели ассоциации в металлических расплавах с различным типом взаимодействия 231
МАГАЛИНСКИЙ В.Б., СИДОРЕНКО С.И.
- Расчет параметров бинаодала, олинодала и критической точки жидких металлов и диэлектриков 233
МАГАЛИНСКИЙ В.Б., КРИКОВ В.А.
- Метод масштабных преобразований в теории гомогенной нуклеации 234
ОГЛОБЛЯ В.И., ГРИНЕНЧУ Г.П., БИШКОВСКАЯ А.И.
- Достоинства и недостатки модельных представлений в описании закономерностей диффузии в жидких металлах 236

КАЛАШНИКОВ Е.В., ГУРИН В.Н. Области различной термодинамической устойчивости систем <i>Cd-Zn</i> , <i>Zn-Te-Zn</i>	238
КОЦУБА А.Т. Аналитические решения концентрационных задач для термодинамических свойств трехкомпонентных растворов	240
ГУШИН А.Н. Квазирешеточные и кластерные модели с позиций теории поля	241
ГАВРИЛИН И.В. Элементы модели кластерного строения жидких металлов	242
ГАВРИЛИН И.В., ШАРИН В.Н., ТИХОНОВ Н.П. Равновесное неоднородное распределение компонентов в жидких сплавах	243
ИВЛЕВ В.И. Частичные сечения рассеяния в бинарных металлических расплавах	244
ИВЛЕВ В.И., БЕГЛОВ В.И., СИГАЧЕВ А.Ф. Параметр беспорядка и энтропия металлических расплавов ..	245
СИДОРОВ В.М., КРИСЬКО О.В. Расчет электросопротивления жидких <i>Cu</i> , <i>Ag</i> , <i>Al</i> и <i>Ni</i> методом решеточного модельного псевдопотенциала	246
ШИБАНОВА Л.Н. Применение модели жестких сфер к расчету энтропии жидких переходных металлов и некоторых сплавов на их основе	247
ЖАСКОВИЧ В.Д., АСАНОВИЧ В.Я., СРЫВАЛИН И.Т., ХМЕЛЕВСКИЙ В.П. Применение метода псевдопотенциала при расчете электронной структуры и свойств в металлических расплавах	248
АСАНОВИЧ В.Я., НАСЕЙКИН В.Д., ХМЕЛЕВСКИЙ В.П., СРЫВАЛИН И.Т. Применение компьютерного моделирования в исследовании расплавов переходных металлов	249
КИЧИН В.В., ПОМИРЧИ Л.М., СОБКО А.А. Новый метод локализации плавления в методе Монте-Карло ...	250
БАЖЕНОВ А.М., БАЗЫЛЕВ С.В. Релаксационный метод расчета коэффициентов диффузии в жидкостях методом молекулярной динамики	252
АНУРСОВ А.К. Метод молекулярной динамики в изобаро-изотермическом ансамбле. Фазовый переход в твердом аргоне при наличии вакансии	253

ГРИЦЕНКО А. В.	
Расчет на ЭЭМ термодинамических свойств разбавленных растворов водорода в жидком и аморфном железе	255
ВАРАКСИН А. Н., ПОЛОСУХИН Б. Г.	
Молекулярно-динамическое моделирование диффузии водорода в расплавленном и кристаллической ниобии	257
КАКЛЮТИН А. С.	
Энтропия Крылова-Колмогорова для газа	259
БЛАГИН Д. В.	
Молекулообразование и ширина областей растворимости в зависимости от атомного веса	260
ГРИВЦОВ А. Г.	
Взаимодиффузия примесных частиц в расплавах и растворах ..	261
ЧУДИНОВ В. Г., Долгушева Е. Б.	
О возможности существования вакансионного механизма фазового перехода твердое тело-жидкость в ГЦК, ОЦК и ГПУ структурах (метод молекулярной динамики).....	263
ПАНОВА Н. Н.	
Анализ абсцисс структурных максимумов функций радиального распределения атомов жидких металлов	265
ПАНОВА Н. Н., ПОПОВА М. Н.	
Моделирование процессов разупорядочения ГЦК-структуры металлов вблизи точки плавления	267
ЧЕСНОКОВ А. П.	
Моделирование кинетических и структурных свойств сплава калий-ртуть методом молекулярной динамики	268
МЕДВЕДЕВ Н. Н., НАБЕРУХИН Ю. И.	
Исследование формы симплексов Делоне в плотных ленард-джонсовских системах	270
ВОЛОШИН В. П.	
Геометрия локальных окружений атомов ленард-джонсовских кристаллов, жидкостей и флюида	272
ПРОЦЕНКО С. П., БАЙДАКОВ В. Г.	
Фазовый переход жидкость-газ в двумерной молекулярно-динамической модели. Размерный эффект.....	275
ШЕНКУНОВ С. В., МАРЦИНОВСКИЙ А. С., ВОРОНЦОВ-ВЕЛЬЯМИНОВ П. Н.	
Использование обобщенного (μPT) ансамбля для расчета химпотенциала кластеров и размера критического зародыша методом Монте-Карло	278

ЛИХАЧЕВ В.А., ШУДЕГОВ В.Е.	
Анализ дефектов в аморфных веществах	281
ЛИХАЧЕВ В.А., ШУДЕГОВ В.Е., ДУДОРОВ В.Ю., ПИСЛЕГИНА Г.А., УСКОВ В.А.	
Дисклинационная модель структуры аморфных металлов и аморфных полупроводников	283
БРОДСКАЯ Е.Н., РУСАНОВ А.И.	
Машинное моделирование микрокластеров воды	285
ПАВЛОВ В.А.	
Термодинамическое описание машинных экспериментов по плавлению микрокристаллов	286
ЗАЙЧЕНКО С.Г., НИКИТИН В.Р.	
Сопоставление характеристик аморфного состояния и модель- ного кластера, содержащего дисклинационные диполи	288
ХАНТАДЗЕ Д.В., ТОПУРИДЗЕ Н.И.	
Статистико-геометрическая интерпретация структуры разбав- ленных неизомегаических смесей	289
ХАНТАДЗЕ Д.В., ТОПУРИДЗЕ Н.И.	
Локальная координация плотнейшего расположения частиц разных размеров	291
СТАРОСТЕНКОВ М.Д., ШАМПУРОВ В.Н.	
Дефекты в упорядоченных сплавах-локализованные области аморфизации кристаллической решетки	292
СТАРОСТЕНКОВ М.Д., МУРАВЬЕВ В.Н., ШАМПУРОВ В.Н.	
Оценка степени аморфизации кристаллической решетки упоря- дочивающегося сплава вблизи точечных дефектов	293
КОТЛЯНСКИЙ М.И., МАЗО М.А., ОЛЕЙНИК Э.Ф.	
Численное моделирование сдвиговой деформации в двумерных аморфных системах	294
БЕРЛИН М.А., НАЗАРЕНКО В.И., САВВ К.Р.	
Применение метода Монте-Карло в физико-химических расчетах углеводородных смесей	295
АЛЬТЕРМАН Л.Е., МИХАЙЛИН А.И.,	
Реализация метода молекулярной динамики на мини-ЭВМ.....	296
МИХАЙЛИН А.И., РОМАНОВ А.Е.	
Машинное моделирование дисклинационных элементов аморфной структуры	
ЗИЛЬБЕРГЛЕЙТ Б.И.	
Перколяционная модель кристаллизации жидких металлов и оценка предельного переохлаждения некоторых металлов	298

ЧЕРЕПАНОВА Т.А., НИММРИХТЕР А., ЯНСОН Ю.А. Моделирование объемных и поверхностных свойств ПЦК-металлов.....	299
ВАЙСБУРД С.Е., КРЕМЕР Э.Л. Использование теории неоднородного ближнего порядка для предсказания термодинамических свойств системы Fe-Co-Ni-S на основании сведений о бинарных граничных подсистемах....	300
МАРШУК Л.А., МОИСЕЕВ Г.К., ПОПОВ С.К. Влияние количества компонентов системы на достоверность термодинамического моделирования (термического разложения S_2O_2)	301
МАРШУК Л.А., МОИСЕЕВ Г.К., ПОПОВ С.К. Зависимость достоверности термодинамического моделирования от точности термодинамических свойств компонентов системы	303
МАСЛЕНКОВ С.Б., УДОВСКИЙ А.Л., ГАЙДУКОВ А.М. Расчет скачков термодинамических функций на фазовых границах двойных диаграмм состояния и его применения	305
ТЕЛИЦИН И.И. Объемная прочность железоуглеродистых расплавов	307
Содержание	309