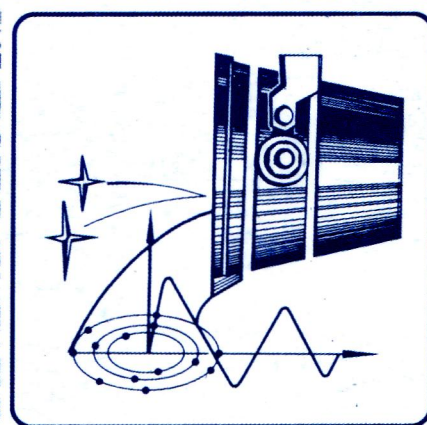


**ТРУДЫ
XIII РОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ШЛАКОВЫХ
РАСПЛАВОВ»**



**Екатеринбург
12 -16 сентября 2011 г.**

Том 1

**МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И
СВОЙСТВ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ В
КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ**

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СЕКЦИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ОСНОВ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НАУЧНОГО
СОВЕТА ПО МЕТАЛЛУРГИИ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЮ РАН
ИНСТИТУТ МЕТАЛЛУРГИИ УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РАН
ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РАН

**ТРУДЫ
XIII РОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ШЛАКОВЫХ
РАСПЛАВОВ»**



**Том 1
МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И
СВОЙСТВ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ В
КОНДЕНСИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ**

Екатеринбург
2011

УДК 669.01

Труды XIII Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов». Т.1. Моделирование и расчет структуры и свойств неупорядоченных систем в конденсированном состоянии. Екатеринбург: УрО РАН, 2011. – 218 с.

ISBN 978-5-7691-2241-5

Труды XIII Российской конференции дают представление о работах в области физикохимии металлических, полупроводниковых и шлаковых расплавов, металлических систем, квазикристаллов, а также о новых способах обработки расплавов и материалов, выполненных в России и странах СНГ со времени последней Российской конференции по данной тематике (2008 г.).

Доклады сборника печатаются в соответствии с авторскими оригиналами.

Конференция проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 11-03-06060-г.

ISBN 978-5-7691-2241-5

© ИМЕТ УрО РАН, 2011

СОДЕРЖАНИЕ

<u>Полухин В.А., Курбанова Э.Д., Ризмант Л.К., Ватолин Н.А.</u> МЕХАНИЗМЫ ПЛАВЛЕНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ХАРАКТЕРА МЕЖАТОМНОЙ СВЯЗИ И СТРУКТУРЫ ВЕЩЕСТВ	4
<u>Дубинин Н.Э., Юрьев А.А., Филиппов В.В., Ватолин Н.А.</u> НОВАЯ СИСТЕМА СРАВНЕНИЯ В ВАРИАЦИОННОМ МЕТОДЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ	8
<u>Полухин В.А., Курбанова Э.Д., Григорьева Т.С.</u> ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТЬ МУАРОВОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ИНТЕРФЕЙСА ПРИ КОНТАКТЕ ГРАНЕЙ НАНОКЛАСТЕРОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ И ГРАФЕНА (ТМе/Г)	12
<u>Воронцов А.Г., Гельчинский Б.Р., Коренченко А.Е.</u> ФОРМИРОВАНИЕ МАЛЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ ПРИ ВЫСОКИХ СТЕПЕНЯХ ПЕРЕСЫЩЕНИЯ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	16
<u>Белащенко Д.К., Воротягин А.В., Гельчинский Б.Р.</u> КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АЛЮМИНИЯ В ОБЛАСТИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ	20
<u>Старухин В.А., Белащенко Д.К., Мирзоев А.А., Воронцов А.Г.</u> ПРИМЕНЕНИЕ ГИБРИДНОГО ПОТЕНЦИАЛА В НРТ АНСАМБЛЕ	23
<u>Соболев А.Н., Мирзоев А.А.</u> МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМЫ «ЖЕЛЕЗО-УГЛЕРОД»	27
<u>Курбанова Э.Д., Полухин В.А., Галашев А.Е.</u> ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРА МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ КЛАСТЕР/ПОДЛОЖКА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА 2D-СПЕЙСЕРОВ ТМе: Ni, Pd, Fe/ГРАФЕН (КВАРЦ)	30
<u>Куц Д.А., Воронцов А.Г.</u> СТРУКТУРА ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПРИ МАЛЫХ ПЛОТНОСТЯХ	34
<u>Рыльцев Р.Е., Сон Л.Д.</u> СТАТИСТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ АМОРФИЗУЮЩИХСЯ РАСПЛАВОВ С ХИМИЧЕСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ: ПРИМЕНЕНИЕ К СИСТЕМАМ Al-PZM	38
<u>Алейникова К.Б., Змейкин А.А., Зинченко Е.Н., Иевлев В.М.</u> ФРАГМЕНТАРНАЯ МОДЕЛЬ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА АМОРФНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ Al ₈₃ Ni ₁₀ La ₇ и Al ₈₇ Ni ₁₀ Nd ₃	42
<u>Поляков А.А.</u> ФРАКТАЛЫ ИЗ ПРАВИЛЬНЫХ ПЯТИУГОЛЬНЫХ ЗВЕЗД	46
<u>Фахретдинов И.А.</u> СИСТЕМА ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ РАДИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАСТВОРОВ В КРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ	50
<u>Краношин В.С., Залкин В.М., Талис А.Л.</u> МЕХАНИЗМ ИЗМЕНЕНИЯ БЛИЖНЕГО АТОМНОГО ОКРУЖЕНИЯ УГЛЕРОДА ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ЕГО КОНЦЕНТРАЦИИ В РАСПЛАВАХ Fe-C	54
<u>Магомедов М.Н.</u> ТРЕХФАЗНОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПРОСТОГО ВЕЩЕСТВА	58
<u>Мясниченко В.С., Старостенков М.Д.</u> МОДЕЛИРОВАНИЕ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОКЛАСТЕРОВ СИСТЕМЫ Cu-Au РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА	62
<u>Коренченко А.Е., Бескачко В.П.</u> ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОБОДНЫХ КОЛЕБАНИЙ ЛЕЖАЩЕЙ КАПЛИ	65
<u>Удовский А.Л.</u> АНИЗОТРОПИЯ СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ В ОЦК РЕШЕТКЕ Fe – ГЛАВНАЯ ПРИЧИНА ВОЗНИКНОВЕНИЯ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА В ФЕРРОМАГНИТНЫХ ОЦК-СПЛАВАХ В СИСТЕМАХ Fe-(Cr, V, Si)	69
<u>Удовский А.Л., Васильев Д.А.</u> К ВОПРОСУ РАЗРАБОТКИ МЕТОДА РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ТРЕХ-ПОДРЕШОТОЧНОЙ	

МОДЕЛИ В ПРИМЕНЕНИИ К СИСТЕМЕ Fe-Cr	73
<i><u>Васин М.Г.</u></i> КАЛИБРОВОЧНАЯ ТЕОРИЯ ПЕРЕХОДА ЖИДКОСТЬ-СТЕКЛО	77
<i><u>Ильиных Н.И., Голубева П.С., Кандазали Л.С.</u></i> ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЛАВОВ GaSb, InSb, AlSb	81
<i><u>Целищев Ю.Г., Вальцифер В.А.</u></i> РАСЧЁТНАЯ ОЦЕНКА КАПИЛЛЯРНЫХ СИЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ, СОЕДИНЁННЫХ ПРОСЛОЙКАМИ ЖИДКОГО МЕТАЛЛА	83
<i><u>Постовалов В.Г., Саттыбаев И.Ж., Романов Е.П., Кондратьев В.П.</u></i> К ТЕОРИИ АТОМНОГО ПЕРЕНОСА В ЖИДКИХ МЕТАЛЛАХ	87
<i><u>Байсанов С.О., Толоконникова В.В., Салина В.А., Нарикбаева Г.И., Корсукова И.Я.</u></i> ЗАКОНОМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ПОЛЕЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ФАЗ СИСТЕМЫ Fe-Si	91
<i><u>Толоконникова В.В.</u></i> АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЛИНИЙ МОНОВАРИАНТНЫХ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДЕРА-ЛЕ-ШАТЕЛЬЕ	96
<i><u>Зинатулина А.Р., Ткачев Н.К.</u></i> АНАЛИЗ АССОЦИАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ ТВЕРДЫХ СФЕР	100
<i><u>Ткачев Н.К., Зинатулина А.Р.</u></i> К ТЕОРИИ АВТОКОМПЛЕКСОВ В ИОННЫХ РАСПЛАВАХ	104
<i><u>Роик А.С., Аникеенко А.В., Медведев Н.Н.</u></i> ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА РАСПЛАВОВ АЛЮМИНИЯ С ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА	108
<i><u>Текучев В.В., Свежинцев Е.Н., Иванова И.В., Рыгалов Л.Н.</u></i> АКУСТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АБСОЛЮТНОЙ ТЕРМО-ЭДС ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ	112
<i><u>Киселев А.И.</u></i> О ВЛИЯНИИ АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ СПЛАВА Al-8 ат.% Ce НА РАСЩЕПЛЕНИЕ ПОЛОСЫ ПРОВОДИМОСТИ	115
<i><u>Углев Н.П., Гаврилин И.В.</u></i> МЕХАНИЗМ РАВНОВЕСНОГО ФУНКЦИОНАЛЬНОГО РАССЛОЕНИЯ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ В КАПИЛЛЯРАХ	118
<i><u>Низовцева И.Г., Галенко П.К.</u></i> УСТОЙЧИВЫЙ РОСТ ДЕНДРИТА С КОНВЕКЦИЕЙ. ЧАСТЬ I. РЕШЕНИЕ МОДЕЛИ В ПРИБЛИЖЕНИИ ОСЕЕНА И УСЛОВИЕ МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ РАЗРЕШИМОСТИ	122
<i><u>Алиев А.Р., Рабаданов К.Ш., Гафуров М.М., Ахмедов И.Р., Какагасанов М.Г., Атаев М.Б.</u></i> МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА РАСПЛАВЛЕННЫХ ГАЛОГЕНИДОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ	126
<i><u>Филиппов Е.С.</u></i> СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЕ В ЖИДКИХ И ТВЁРДЫХ МЕТАЛЛАХ И КВАНТОВАНИЕ ОБЪЁМА	130
<i><u>Белащенко Д.К., Дюльдина Э.В.</u></i> КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ РАСПЛАВА МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ШЛАКООБРАЗУЮЩЕЙ СМЕСИ: ВЗАИМОСВЯЗЬ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ	133
<i><u>Горбунов В.А.</u></i> ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ В РАСЧЁТАХ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ КЛАСТЕРОВ АЛЮМИНИЯ, СОДЕРЖАЩИХ ПРИМЕСНЫЕ АТОМЫ 3d - МЕТАЛЛОВ ПОДГРУППЫ ЖЕЛЕЗА	137
<i><u>Киселев А.И.</u></i> О ВОЗМОЖНОСТИ ПЕРЕХОДА "МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР" В ЖИДКИХ СПЛАВАХ МЕТАЛЛОВ III ГРУППЫ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ СО ЩЕЛОЧНЫМИ МЕТАЛЛАМИ	141
<i><u>Киселев А.И., Крашанинин В.А.</u></i> ОЦЕНКА ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСПЛАВОВ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ В МЕТОДЕ ПЕРВОПРИНЦИПНОГО ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА	144
<i><u>Юрьев А.А., Гельчинский Б.Р.</u></i> О ВОЗМОЖНОСТЯХ РАСЧЕТА СВОЙСТВ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ПЕРВОПРИНЦИПНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	147

<u>Крашанинин В.А., Жилина Е.М., Александрова С.С.</u> ПЕРВОПРИНЦИПНЫЙ РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСПЛАВОВ Rb, Mg, Al.....	149
<u>Дейч Д.Б., Косилов А.Т.</u> СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ МОЛЕКУЛЯРНО–ДИНАМИЧЕСКОГО ОХЛАЖДЕНИЯ МОДЕЛИ СПЛАВА Fe ₈₃ V ₁₇ ..	153
<u>Король А.В., Косилов А.Т., Миленин А.В.</u> СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА Cu ₈₀ Zr ₂₀	155
<u>Самсонников А.В., Роик А.С., Муратов А.С., Казимиров В.П., Сокольский В.Э.</u> МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ АЛЮМИНИЯ В ШИРОКОМ ТЕМПЕРАТУРНОМ ИНТЕРВАЛЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.	159
<u>Хадеев И.И., Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В.</u> АМОРФНОМ МЕТАЛЛИЧЕСКОМ СПЛАВЕ Ni ₃₃ Zr ₆₇	163
<u>Жукова Л.А., Жуков А.А.</u> ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ЖИДКИХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА	167
<u>Хрущев Б.И.</u> ПОГЛОЩЕНИЕ ПОЗИТРОНОВ В НАТРИИ	170
<u>Обухов А.А., Ладьянов В.И., Васин М.Г., Лебедев В.Г.</u> ВАРИАЦИОННЫЙ ПОДХОД К ЧИСЛЕННОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ПРОЦЕССА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ	172
<u>Байдаков В.Г., Типеев А.О.</u> ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ НА ИСКРИВЛЕННОЙ ГРАНИЦЕ КРИСТАЛЛ-ЖИДКОСТЬ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ	176
<u>Бондарев А.В., Ожсерельев В.В., Батаронов И.Л., Бармин Ю.В.</u> КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ АМОРФНЫХ ТЕРБИЯ И ГАДОЛИНИЯ	178
<u>Ильиных Н.И., Сидоров В.Е., Куликова Т.В.</u> ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЛАВОВ СИСТЕМ Al-RZM, Al-O И Al-RZM-O	181
<u>Харламова О.Г., Юрьев А.А., Дубинин Н.Э., Ватолин Н.А.</u> РАСЧЕТ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ БХАТИА-ТОРНОТОНА БИНАРНЫХ РАСПЛАВОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ ИЗ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ДАННЫХ.....	184
<u>Рыльцев Р.Е.</u> СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕЖЧАСТИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИСТЕМ С НАПРАВЛЕННЫМИ СВЯЗЯМИ	187
<u>Куликова Т.В., Майорова А.В., Быков В.А., Ильиных Н.И., Шуняев К.Ю.</u> ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Al-Sm	190
<u>Мальшев В.П., Турдукожаева А.М.</u> КЛАСТЕРНО-АССОЦИАТНАЯ МОДЕЛЬ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ НА ОСНОВЕ КОНЦЕПЦИИ ХАОТИЗИРОВАННЫХ ЧАСТИЦ.....	194
<u>Целищев Ю.Г., Стрельников В.Н.</u> РАСЧЁТНАЯ ОЦЕНКА КАПИЛЛЯРНОГО ДАВЛЕНИЯ В ПРОСЛОЙКЕ ЖИДКОГО МЕТАЛЛА МЕЖДУ ЧАСТИЦАМИ.....	198
<u>Потапов А.М., Кумков С.И.</u> СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВЛЕННЫХ СОЛЕЙ НА ПРИМЕРЕ ХЛОРИДА ТЕРБИЯ.....	201
<u>Александров В.Д., Фролова С.А.</u> МЕТОД ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ С УЧЕТОМ ЖИДКО-ТВЕРДОГО СОСТОЯНИЯ	205
<u>Низовцева И.Г., Галенко П.К.</u> УСТОЙЧИВЫЙ РОСТ ДЕНДРИТА С КОНВЕКЦИЕЙ. ЧАСТЬ II. АНАЛИЗ МОРФОЛОГИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ И КРИТЕРИЙ ОТБОРА СКОРОСТИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ.....	208
<u>Дубинин Н.Э.</u> РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСПЛАВОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С УЧЕТОМ НЕДИАГОНАЛЬНОГО ПЕРЕКРЫТИЯ d-ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В МОДЕЛИ ВИЛЛСА-ХАРРИСОНА.....	212
Авторский указатель	214
СОДЕРЖАНИЕ.....	215