

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
УРАЛЬСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР
ИНСТИТУТ МЕТАЛЛУРГИИ

**Научные сообщения
IV Всесоюзной конференции по
строению и свойствам металлических
и шлаковых расплавов**

Часть I

Свердловск — 1980

СОДЕРЖАНИЕ I ЧАСТИ

	Стр.
Гурский Э.А., Сыротка С.В., Дутчак Я.И., Маснык Я.И. Классификация металлов в рамках метода псевдопотенциалов	1
Юхновский И.Р., Гурский Э.А., Зеленчук И.М., Вараницкий В.И. Статистическая теория бинарных сплавов металлов	5
Харьков Е.И., Исай В.Н., Руденко А.Г. Модель нейтральных псевдоатомов для жидких бинарных сплавов непереходных металлов	9
Шебзухов А.А., Арапова Т.П. К расчету некоторых физических свойств металлических сплавов в основном состоянии методом функционала электронной плотности	13
Юрьев А.А., Ухов В.Ф. Построение модельного псевдопотенциала и проблема его однозначности	16
Юрьев А.А., Гельчинский Б.Р. Вычисление коллективных колебаний в жидких и кристаллических металлах	20
Юрьев А.А. Об учете влияния температуры при расчете атомных свойств металлов	24
Горбунов В.А., Асанович В.Я., Катшова Л.В., Срывагин И.Т. Расчет и анализ электронной структуры расплавов переходных металлов при небольших перегревах	27

Прохоренко В.Я. Неравновесная структура и электрические свойства металлизировавшихся расплавов	31
Филиппов Е.С. Объемно-деформационная модель атома для конденси- рованного состояния	35
Белашенко Д.К., Хромушин В.А., Ефанова В.П. Изучение одно- и двухкомпонентных жидких систем с помощью модифицированного уравнения Перкуса-Иввика	38
Шпильрайн Э.Э., Каган Д.Н., Кречетова Г.А. Характеристики межатомного взаимодействия жидких бинарных расплавов щелочных металлов при высоких температурах	42
Скрипов В.П. Термодинамическое подобие линий плавления простых веществ	46
Байдаков В.Г. Статические и динамические критерии устойчивости переохлажденного жидкого расплава	50
Харьков Е.И., Лысов В.И., Федоров В.Е., Цыганов Н.П. Теория и методика расчета молярных объемов жидких бинарных сплавов непереходных металлов в рамках метода псевдопотенциала	54
Кремер Э.Л., Вайсбург С.Е. Термодинамика сплавов с неизингговским характером мезочастичного взаимодействия	57
Коваленко Н.П., Кузьмина Л.М. Термодинамика жидких металлов с учетом многочас- тичных эффектов	61

Колесников С.П., Валишев М.Г., Есия Ю.О., Гельд П.В., Петрушевский М.С. К расчету теплот образования жидких бинарных сплавов	64
Павлова Л.М., Поярков К.Б. Строение металлических расплавов в двойной системе <i>Mg</i> с элементами IV группы периодической системы	68
Сривалии И.Т., Корпачев В.Г. О вкладе различных факторов в энтропию смешения ме- таллических сплавов	72
Бурылев Б.П. Расчет термодинамических свойств и температур кипе- ния из данных об общем давлении пара	75
Байдак Г.В., Белашенко Д.К. О возможности прогнозирования эффективных зарядов компонентов в расплавах бинарных систем	77
Козин Л.Ф., Дергачева М.Б., Чесноков А.П. Определение колебательного вклада в избыточную энтро- пию смешения жидких сплавов	81
Швец В.Т. Оптические свойства переходных жидких металлов	85
Сухман А.Л., Кононенко В.И., Грумерман С.Л., Торо- кин В.В. Поверхностные свойства жидких редкоземельных метал- лов	89
Довгопол М.П., Сермягин В.Н., Карпов Г.Н., Кудряв- цева Е.Д. Метод расчета плотности бинарных металлических рас- плавов в приближении почти свободных электронов	93
Красный М.П., Каим С.Д. О поверхностной энергии жидкого металла	97

Яценко С.П., Постовалов В.Г. Расчет магнитной восприимчивости жидких сплавов щелочных металлов с поливалентными металлами	101
Пашаев Б.П., Палчаев Д.К., Белан И.И. Расчет электросопротивления многовалентных непреходящих жидких металлов в приближении метода псевдопотенциала	105
Хохлов С.Ф. Структурно-статистические аспекты теории аморфного состояния	109
Панин В.Е., Хоровков И.Ф., Ланда А.И. Расчет диаграммы состояния эвтектической системы <i>Cd - Zn</i>	113
Колесников А.Н., Степанов В.М., Яньков С.В. Особенности диаграмм состояния бинарных металлческих систем в приближении твердых сфер	117
Назаренко В.И., Полухин В.А. Большой канонический ансамбль в методе молекулярной динамики	121
Полухин В.А. Структурные превращения в жидких металлах: многогранники Вороного и Делоне	124
Криночкин Э.В. Равновесие гетерогенных масс	128
Павлов В.В., Негодаева Н.Ю., Панова Н.Н., Сергин Б.И. Исследование процессов кластерообразования методами молекулярной динамики	132

Харьков Е.И., Федоров В.Е., Цыганов Н.Л., Руденко А.Г. Теория и методика расчета парциальных термодинамических функций бинарных сплавов непереходных металлов в рамках метода псевдопотенциала	136
Лисов В.И., Цыганов Н.Л., Исаев В.И. Теория и методика расчета теплот образования жидких бинарных сплавов непереходных металлов в рамках метода псевдопотенциала	140
Федоров В.Е. Метод расчета параметров структуры и удельного объема жидких бинарных сплавов по рентгенографическим данным	144
Лисов В.И., Руденко А.Г., Новиков В.Н. Концентрационная зависимость сжимаемости жидких бинарных сплавов непереходных металлов в рамках метода псевдопотенциала	148
Исаев В.Н., Харьков Е.И., Лисов В.И. Анализ взаимосвязи внутренней энергии и структуры в жидких непереходных металлах	
Гедьчиноский Б.Р., Лисцов А.А., Кобелева Р.М. Расчет поверхностного натяжения металлов методом псевдопотенциала	152
Максименко В.В., Ухов В.Ф. Расчет диаграмм состояния на ЭВМ	156
Коваленко Н.П., Кузьмина Л.И. Скорость звука в жидких металлах с учетом многочастичных межионных корреляций	158
Коваленко Н.П., Кузьмина Л.И. Соотношения между структурными факторами жидких металлов	161

	Стр.
Каим С.Д. О межионном взаимодействии в приповерхностном слое жидкого металла	164
Каим С.Д. Об особенностях поляризационного оператора полуог- раниченного электронного газа	168
Коваленко Н.П., Кузьмина Л.М. Межионное взаимодействие в жидких металлах . . .	172
Ивец В.Т. Электропроводность переходных жидких металлов . .	175
Гапчин Б.М., Прохоренко В.Я., Якибчук П.Н. Плотность состояний и электросопротивление жидких сплавов благородных металлов с поливалентными . .	179
Михайлова Л.Е., Ильинский А.Г., Романова А.В. Особенности строения жидких бинарных сплавов в рам- ках модели нейтральных псевдоатомов	182
Бескачко В.П. Расчет формфакторов и характеристических функций простых металлов из первых принципов	186
Монькин В.Д. Расчет удельного электросопротивления жидких пере- ходных металлов и некоторых бинарных расплавов зо- лота в приближении методов псевдопотенциала и ϵ - матрицы	190
Пинскер Г.З. Анизотропия ближнего порядка расплавов	194
Френчко В.С., Кузнецова Л.С., Турко К.А. Оценка межатомного взаимодействия в расплавах трой- ных систем по данным дифрактометрии	198

	Стр.
Асанович В.Я., Горбунов В.А., Катыхова Л.В. Влияние ближней упорядоченности на электронную структуру расплавов	202
Киселев В.Ф., Козин Л.Ф., Нигметова Р.Ш. Расчет удельного электросопротивления амальганных систем	206
Спиридонов М.А., Корочкина Л.В. Расчет удельного электрического сопротивления алюминийгаллиевых расплавов по дифракционным данным	210
Мирзоев А.А., Довгопол С.П. Магнитные свойства разбавленных расплавов $Fe - V$, $Fe - C - V$	213
Костенко В.М. Применение метода возмущений к системам уравнений Перкуса-Йевики для жидкой бинарной смеси	217
Криночкин Э.В. Гомогенное зарождение новых фаз в объеме старой фазы	221
Криночкин Э.В. Химические потенциалы компонентов гомогенных и гетерогенных масс	225
Павлов В.В., Панова Н.Н., Негодаева Н.Ю., Сергин Б.И. Исследование молекулярного механизма вязкого течения и диффузии в упорядоченной и разупорядоченной жидкости методом молекулярной динамики	229
Филиппов Е.С. Модель фазовых переходов (плавление, кипение, переходы в жидких металлах), как следствие принципа неопределенности	233

Павлов В.В., Панова Н.Н., Игодаева Н.Ю. Эволюция функции радиального распределения атомов при моделировании сдвиговой деформации системы методом молекулярной динамики	236
Сойфер Л.М. Гистерезис структурночувствительных свойств расплавов с позиций модели кластерных компонентов	240
Дохов М.П., Кипов И.Г., Афаунов М.Х. Расчет межфазной энергии некоторых веществ на границе раздела полиморфных фаз.	246
Мойсов Л.П., Бурмев Б.П., Джасраилова П.А. Определение энергий межчастичного взаимодействия компонентов на основании экспериментальных данных о термодинамической активности	250
Белашенко Д.К., Борисов А.П., Хромушин В.А. Структура, термодинамические свойства и самодиффузия однокомпонентных жидкостей с чисто отталкивательным потенциалом взаимодействия атомов. Применение к жидким металлам	252
Коцуба А.Т. Исследование общего вида зависимости термодинамических свойств бинарных растворов от состава	255
Галашев А.Е., Скрипов В.П. Молекулярно-динамическое изучение структуры простой жидкости по геометрическим характеристикам относительно идеальных кристаллических решеток	258
Смирнова О.Н. Корреляция термодинамических свойств жидких тройных амальгам с различными физическими факторами	262

	Стр.
Коренчук Н.М., Бурдейный А.Н., Тищенко И.А. Фазовые равновесия квазибинарных систем	266
Басин А.С. Соотношение между критической плотностью расплава и плотностью кристалла	268
Степанова Н.В., Лепинских Б.М. Аналитический метод расчета коэффициента вязкости по данным рентгеноструктурного анализа.	271
Гаврилия И.В., Ершов Г.С. Диффузия в микрогетодородных жидких металлах.	274
Иковлев В.М. О дисперсионном вкладе в межфазную энергию границы металлической и диэлектрической жидкостей	277
Вашуков И.А. Механизм влияния элементов на растворимость водорода в жидком железе	281
Назаренко В.И., Белякова Р.М., Полушкин В.А. Модель жидкого металла при температуре плавления	285
Дзугуттов И.М., Белякова Р.М. Масштаб анизотропии в жидких и аморфных металлах	288
Белякова Р.М. Расчет автокорреляционной функции скоростей и коэффициентов переноса для жидкого железа методами молекулярной динамики	291
Катышева Л.В., Асанович В.И., Горбунов В.И. Машинное моделирование структуры металлических расплавов методом Монте-Карло.	295