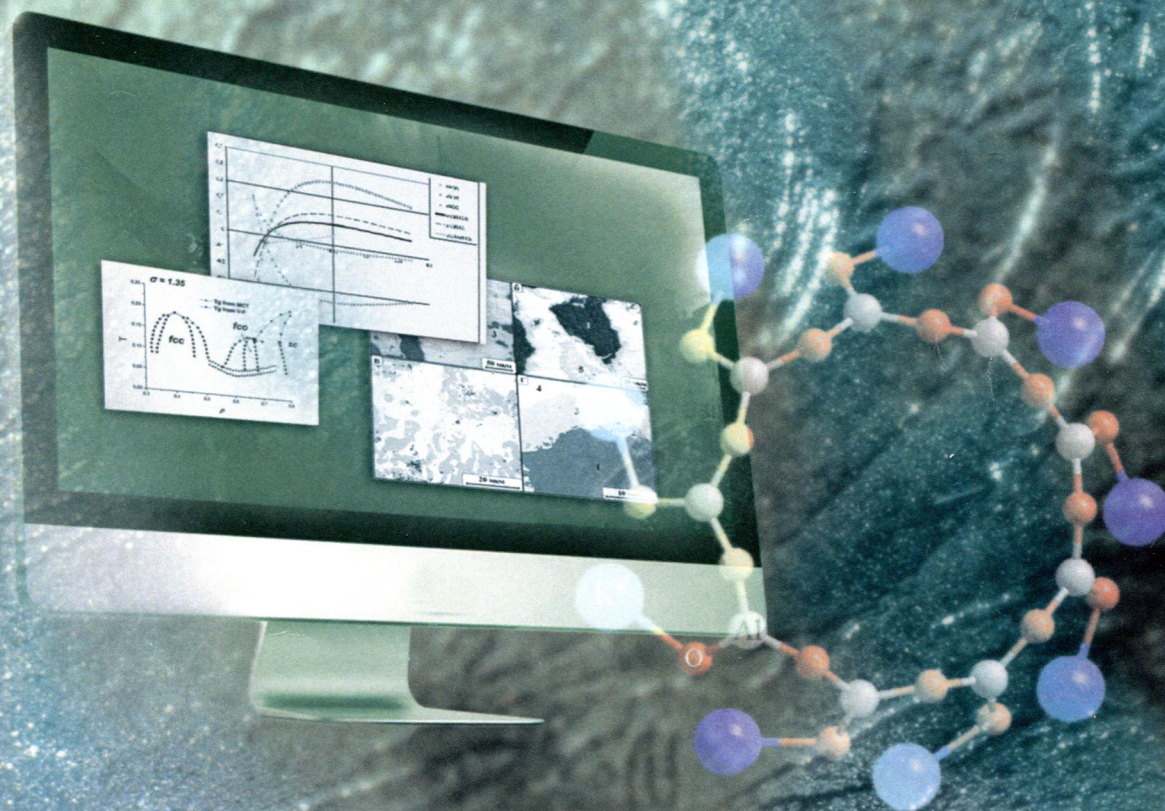


КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТЕКЛОЛ И РАСПЛАВОВ

Труды XII Российского семинара



*МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Курганский государственный университет»*

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТЁКОЛ И РАСПЛАВОВ

Труды XII Российского семинара

14-17 октября 2014, г. Курган

Курган 2014

УДК 666.1:681.3.06(08)

К 63

Компьютерное моделирование физико-химических свойств стекол и расплавов: труды XII Российского семинара / под общей ред. Б.С. Воронцова. Курган: Изд-во Курганского гос. ун-та, 2014. 90 с.

В сборник включены материалы, посвященные модельным исследованиям атомарной структуры, физико-химических свойств, диаграмм состояния многокомпонентных расплавов и стекол, их поверхностных свойств и технологических процессов с применением этих объектов.

ISBN 978-5-4217-0274-0

© Курганский
государственный
университет, 2014
© Авторы, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1

«КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И МОДЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СТЕКОЛ И РАСПЛАВОВ»

Удовский А.Л. ВЗАИМОСВЯЗЬ МАГНИТНЫХ С КОНФИГУРАЦИОННЫМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА СИСТЕМУ УРАВНЕНИЙ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ОЦК–ФЕРРОМАГНИТНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМ FE-(CR,V,MO,W).	7
Ридный Я.М., Мирзоев А.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ ЭНЕРГИИ РАСТВОРЕНИЯ АТОМА УГЛЕРОДА В ПАРАМАГНИТНОМ ГЦК-ЖЕЛЕЗЕ.	9
Тягунов Г.В., Барышев Е.Е., Тягунов А.Г. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ.	10
Юрьев А.А., Гельчинский Б.Р., Водолазкина Е.А. ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ И КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСПЛАВА NA-CS МЕТОДОМ ПЕРВОПРИНЦИПНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.	12
Воронцов Б.С., Бухтояров О.И. ДИНАМИКА МОДЕЛЕЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СТЕКЛООБРАЗУЮЩИХ ОКСИДНЫХ РАСПЛАВОВ, ОСНОВАННЫХ НА МЕТОДЕ МОНТЕ-КАРЛО.	13
Верховых А.В., Мирзоев А.А. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С ГРАНИЦЕЙ ЗЕРНА ОЦК-ЖЕЛЕЗА В ПРОГРАММНОМ ПАКЕТЕ WIEN2K.	16
Вершинин А.О., Хохряков А.А., Пайвин А.С., Истомина С.А. КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ SE^{3+} В ЩЕЛОЧНОБОРАТНЫХ РАСПЛАВАХ.	18
Павлов В.В., Потапов А.М. ЗАТВЕРДЕВАНИЕ КАК СЛЕДСТВИЕ КВАНТОВОГО ВЫМОРАЖИВАНИЯ АТОМАРНЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ.	19
Юрьев А.А., Гельчинский Б.Р., Вязникова Е.А. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЖИДКИХ NA И CS ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ.	21
Рыльцев Р.Е., Щелкачев Н.М. МУЛЬТИСТАДИЙНАЯ ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРНЫХ И ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ФЛЮИДАХ.	22
Тягунов А.Г., Вьюхин В.В., Тягунов Г.В., Барышев Е.Е., Акшенцев Ю.Н. ФИЗИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЖИДКИХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ NI-CR.24	
Гойда Э.Ю., Бодрова Л.Е., Пастухов Э.А. О ФОРМИРОВАНИИ CORE-SHELL-СТРУКТУР В РАСПЛАВЕ МЕДИ С УЧАСТИЕМ ГРАФИТА.26	
Игнатъев И.Э. О ПРЕДЕЛЕ ПРОЧНОСТИ КАК ПАРАМЕТРЕ В МОДЕЛЯХ РАЗЛИЧНЫХ ПРОЦЕССОВ.	27
Рыльцев Р.Е., Сон Л.Д., Шуняев К.Ю. ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВОГО РАССЛОЕНИЯ В СИСТЕМАХ С НАПРАВЛЕННЫМИ СВЯЗЯМИ.	29
Москвин В.В., Воронцов Б.С. ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВОХИМИЧЕСКОГО МЕТОДА RM7 ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНЕРГИЙ МЕЖЧАСТИЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ.	31
Рябов А.В., Панфилов А.М., Семенова Н.С. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ВИСМУТОВОГО ШАРИКА В СТАЛЬНОМ РАСПЛАВЕ.32	

СЕКЦИЯ 2

«ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТЕКОЛ И РАСПЛАВОВ»

Михайлов Г.Н., Макровец Л.А. ТЕРМОДИНАМИКА ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЦЕРИЯ И АЛЮМИНИЯ С КИСЛОРОДОМ В ЖИДКОМ ЖЕЛЕЗЕ.	34
---	----

Васильев Д.А., Удовский А.Л. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ, СПИНОДАЛИ И ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ ОЦК-СПЛАВОВ БОГАТЫХ ЖЕЛЕЗОМ В СИСТЕМЕ FE-CR.	36
Трофимов Е.А. ОБРАЗОВАНИЕ ОКСИДНЫХ ФАЗ ПРИ ОКИСЛЕНИИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО РАСПЛАВА СИСТЕМЫ CU-PB-SN-ZN.	39
Камаев Д.Н. РАСЧЕТ ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ ВЕО-AL ₂ O ₃ . K.	40
Танклевская Н.М., Михайлов Г.Г. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ НИЗКОУГЛЕРОДИСТОГО ФЕРРОХРОМА ИЗ МЕСТНЫХ РУД.	43
Ильиных Н.И., Злобин А.И. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОЕДИНЕНИЙ A ^{III} -B ^V	45
Самойлова О.В., Михайлов Г.Г., Макроец Л.А., Трофимов Е.А. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛИНИИ ЛИКВИДУС ДИАГРАММЫ СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ CU ₂ O-ZRO ₂	47
Власов В.Н. КОМПЛЕКСНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФАЗ В СИСТЕМЕ FEO-AL ₂ O ₃	48
Трофимов Е.А., Вахитова Е.Р. ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ УСЛОВИЙ ОБРАЗОВАНИЯ КАРБИДА КРЕМНИЯ В СЛОЖНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВАХ.	50
Мансурова А.Н., Чумарев В.М., Селиванов Е.Н., Гуляева Р.И., Ковров В.А. ВЛИЯНИЕ МЕХАНОАКТИВАЦИИ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И СТРУКТУРУ КОМПОЗИТА СИСТЕМЫ NiO-Fe ₂ O ₃ -Cr ₂ O ₃ -Cu.	50
Потапов А.М. ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НИТРИДА КЮРИЯ.	52
Волгарев Е.А., Ильиных Н.И. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И СВОЙСТВА ОПТОВОЛОКНА.	53

СЕКЦИЯ 3

«ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ, МЕЖФАЗНЫХ ПРОЦЕССОВ И ПОВЕРХНОСТНЫХ СВОЙСТВ СТЕКОЛ И РАСПЛАВОВ»

Гусева С.В., Лыкасов А.А., Тепляков Ю.Н. КИНЕТИКА ОКИСЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКОЙ СТАЛИ, ЛЕГИРОВАННОЙ КРЕМНИЕМ, НА ВОЗДУХЕ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР 540-820°C.	56
Шубин А.Б., Шуняев К.Ю. ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ МНОГОФАЗНОГО СПЛАВА Cu-Ga-In-Bi-Sn.	58
Созыкина А.С., Окишев К.Ю., Гребенщикова А.Г., Мирзаев Д.А. КИНЕТИКА РАСТВОРЕНИЯ КАРБИДОВ (CR, FE) ₇ C ₃ В ГАММА-ФАЗЕ ВЫСОКОХРОМИСТЫХ СПЛАВОВ ЖЕЛЕЗА С УГЛЕРОДОМ.	59
Куликова Т.В., Белозерова А.А., Быков В.А. КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНОГО СПЛАВА Al ₈₆ Ni ₈ Ho ₆	60
Белякова Р.М., Ригмант Л.К., Полухин В.А., Курбанова Э.Д. ПРИРОДА МЕЖАТОМНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В КОНТАКТНОЙ ЗОНЕ МЕТАЛЛ – ГРАФЕНОВЫХ ПЛОСКОСТЕЙ.	62
Котенков П.В., Попова Э.А., Астафьев В.В., Майков В.В., Бродова И.Г., Яблонских Т.И., Пастухов Э.А. ПОЛУЧЕНИЕ ЛИГАТУР С НАНОРАЗМЕРНЫМИ И СУБМИКРОННЫМИ КАРБИДАМИ И БОРИДАМИ ТИТАНА.	64

Филиппов В.В., Ягодин Д.А. МЕЖФАЗНОЕ НАТЯЖЕНИЕ НА ГРАНИЦЕ ЖИДКОСТЬ-ЖИДКОСТЬ В СИСТЕМАХ G_A-X ($X = CD, VI, PB$).	65
Шаров А.В., Морозова Т.В. ПРОТОЛИТИЧЕСКИЕ РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ СИЛИКАГЕЛЬ-ВОДНЫЙ РАСТВОР ЭДТА.	67
Мансурова А.Н., Чумарев В.М., Селиванов Е.Н., Гуляева Р.И., Ковров В.А. ФАЗООБРАЗОВАНИЕ ПРИ СИНТЕЗЕ КЕРМЕТОВ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ $NiO-Fe_2O_3-Cr_2O_3-Cu$	69
Рябов А.В. ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРИМОСТИ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ С НИЗКИМИ ТЕМПЕРАТУРАМИ ПЛАВЛЕНИЯ И КИПЕНИЯ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА.	70
С.Н.Агафонов, С.А.Красиков, В.П.Ченцов. МЕЖФАЗНОЕ НАТЯЖЕНИЕ МЕЖДУ МЕТАЛЛОМ И ШЛАКОМ ПРИ МЕТАЛЛОТЕРМИЧЕСКОМ ВОССТАНОВЛЕНИИ ZrO_2	70
Шаров А. В., Попов И. С. ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ДЛЯ ХАРАКТЕРИСТИКИ КИСЛОТНЫХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ СИЛИКАГЕЛЯ.	71
Купцов С.Г., Фоминых М.В., Мухинов Д.В., Магомедова Р.С., Саражин Л.В. СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ ЭИЛ ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫХ СТАЛЕЙ. ...	73

СЕКЦИЯ 4

«ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ УСТАНОВКИ И БАЗЫ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ДАННЫХ ПО СТЕКЛАМ И РАСПЛАВАМ»

С.А. Истомин, В.П. Ченцов, А.А. Хохряков, А.В. Иванов, В.В. Рябов, Н.В.Корчемкина ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ НАТРИЕВОБОРАТНЫХ РАСПЛАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫЕ ДОБАВКИ ОКСИДОВ РЗЭ.	76
Хохряков А.А., Пайвин А.С., Вершинин А.О. ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ РАСТВОРОВ ФТОРИДА ПРАЗЕОДИМА В РАСПЛАВЛЕННЫХ ФТОРИДАХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ.	77
Чумилина Л.Г., Денисова Л.Т., Белецкий В.В. ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $PrCuO_4$ и $PrVO_4$	79
Денисова Л.Т., Чумилина Л.Г., Бабицкий Н.А. ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ ОКСИДНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СИСТЕМЫ $Bi_2O_3 - P_2O_5$	80
Удовский А.Л., Смирнов И.С., Монахов И.С., Новоселова Е.Г. РЕНТГЕНОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ РАЗМЕРОВ ОКР ДЛЯ ОЦК СПЛАВОВ СИСТЕМ $Fe-(Cr,V,Mo)$	81
Потапов А.М., Салюлев А.Б. ОЦЕНКА ПЛОТНОСТИ РАСПЛАВЛЕННЫХ $BeCl_2$, $ZnCl_2$ И $PbCl_2$ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР.	83
Истомин С.А., Хохряков А.А., Иванов А.В., Ченцов В.П., Рябов В.В., Корчемкина Н.В. ПЛОТНОСТЬ НАТРИЕВОБОРАТНЫХ РАСПЛАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫЕ ДОБАВКИ ОКСИДОВ РЗЭ (La, Ce, Pr, Nd).	85
Филиппов В.В., Упоров С.А., Быков В.А., Шуняев К.Ю., Гельчинский Б.Р. АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ВЯЗКОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ.	86
Рябов В.В., Истомин С.А., Иванов А.В., Пайвин А.С. ВЯЗКОСТЬ НАТРИЕВОБОРАТНЫХ РАСПЛАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫЕ ДОБАВКИ ОКСИДОВ РЗЭ (La, Ce, Pr, Nd, Dy, Ho).	88
Иванов А.В., Истомин С.А., Рябов В.В., Пайвин А.С., Хохряков А.А. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ НАТРИЕВОБОРАТНЫХ РАСПЛАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ МЕХАНОАКТИВИРОВАННЫЕ ДОБАВКИ ОКСИДОВ РЗЭ.	89