

АКАДЕМИЯ НАУК СССР  
УРАЛЬСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР  
ИНСТИТУТ МЕТАЛЛУРГИИ

ТЕЗИСЫ НАУЧНЫХ СООБЩЕНИЙ  
III ВСЕСОЮЗНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ ПО СТРОЕНИЮ И  
СВОЙСТВАМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ И ШЛАКОВЫХ РАСПЛАВОВ

**Ч. 1. ТЕОРИЯ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ  
И ДИФРАКЦИОННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ**

(22—23 сентября)

г. СВЕРДЛОВСК—1978 г.

## СОДЕРЖАНИЕ I ЧАСТИ

Стр.

Манов В.П., Попель С.И. Особенности ближнего порядка жидких металлов, вытекающие из дифракционных экспериментов.....	I
Сергин Б.М., Мень А.Н., Фетисов В.Б. Квазихимическое приближение кластерной модели для металлических расплавов.....	5
Негодзаева Н.Ю., Сергин Б.И. Описание физико-химических и термодинамических свойств систем на основе палладия с позиций кластерной модели.....	9
Дедков Г.В. Оценка вклада осцилляций атомной плотности электронов в поверхностную энергию металла в статистическом приближении.....	12
Ербунов В.А., Асанович В.Я. Плотность состояний жидких переходных металлов и их сплавов.....	16
Срывалин И.Т., Корпачев В.Г. Особенности термодинамических свойств систем с сильным взаимодействием компонентов.....	19
Кобелева Р.М. Исследование величины поверхностной энергии металлов в зависимости от параметров псевдопотенциала.....	23
Кобелев А.В., Кобелева Р.М., Ухов В.Ф. К теории адгезии двух металлических поверхностей.....	28
Манов В.П. Стрессение расплавов Al - Ca вблизи ликвидуса в широком концентрационном интервале.....	32
Коваленко Н.П., Кузьмина Л.М.	

Влияние многочисленных эффектов на потенциал эффективного бинарного взаимодействия в жидких металлах.....	36
Красный Ю.П., Каим С.Д. Граничное условие для функции распределения электронов проводимости на границе жидкого металла.....	40
Швец В.Т. Электропроводность жидких металлов в магнитном поле....	44
Коваленко Н.П., Швец В.Т. Электросопротивление жидких металлов с учетом многочисленных корреляций.....	47
Есин Ю.О., Валишев М.Г., Гельд П.В. К расчету электронного вклада в теплоты образования бинарных сплавов $3d$ -переходных металлов с никелем....	51
Лысов В.И., Харьков Е.И. Уравнение состояния и термодинамические свойства жидких металлов в рамках метода псевдопотенциала.....	55
Исай В.Н., Лысов В.И., Харьков Е.И. Структура жидких металлов в рамках модели мягких сфер....	58
Асанович В.Я., Горбунов В.А., Срывалин И.Т., Таланова Л.Ф. О корреляции плотности состояний с электрокинетическими характеристиками расплавов.....	62
Островский П.И., Григорян В.А. Термодинамические расчеты для расплавов на основе железа и никеля с использованием теории псевдопотенциала.....	65
Валухов И.А., Жуков А.А. Механизм влияния элементов на вязкость жидкого железа....	69
Баталин Г.И., Кузьменко Н.И., Судаццева В.Т.	

Расчет активности кислорода в жидких сплавах на основе меди.....	73
Кари Э.М., Сербин Б.И., Кондратьев В.П. Определение координационных чисел, межатомных расстояний и нормировочного множителя на экспериментальной кривой интенсивности.....	77
Вайсбурд С.Е., Кремер Э.М. Некоторые вопросы статистической термодинамики сплавов со сложным характером межчастичного взаимодействия компонентов.....	81
Кощоба А.Т. Уточнение зависимости термодинамических свойств бинарных растворов от состава.....	85
Кремер Э.М. Комбинаторный фактор и статистическая сумма раствора в модели со сложным характером межчастичного взаимодействия.....	89
Манов В.П., Разикова Н.И., Цопель С.И. Строение расплавов $Pb - Bi$ , выявленные методом электронографии.....	93
Хохлов С.Ф. Коррелятивные функции как решение задачи статистической механики.....	97
Якубчик В.П., Левин Е.С. Расчет микроскопических свойств бинарных сплавов никеля с германием на основе данных дифракционного эксперимента.....	101
Мельник Б.А. Методика рентгеноструктурного анализа струи металлического расплава.....	103

- Мельник В.А.  
Методика исследования электронной структуры распла-  
вой по спектрам поглощения рентгеновских лучей.....I07
- Исай В.Н.  
Анализ рентгенографических данных по структуре жидких  
металлов.....I11
- Алексеев Ю.С., Левин Е.С.  
Изучение структуры ближнего порядка в аморфных плен-  
ках марганец-германий.....I15
- Маркелов Н.Д., Спектор Е.З.  
Сравнение структуры жидких и аморфных сплавов переход-  
ных металлов.....I17
- Баум Б.А., Базин Ю.А., Кличенков Е.А., Мариев С.А.  
Исследование структуры ближнего порядка жидких спла-  
вов железа с углеродом.....I20
- Сокольский В.Э., Баталин Г.И., Казимиров В.И., Шов-  
ский В.А., Подгаецкий В.В., Галинич В.И.  
Рентгенографическое исследование строения расплавов  
некоторых силикатных систем.....I24
- Карета А.Н., Харьков Е.И.  
Расчет электронной теплопроводности жидких непере-  
ходных металлов в рамках метода псевдопотенциалов.....I28
- Гельчинский Б.Р., Юрьев А.А., Ухов В.Ф.  
Модельный псевдопотенциал для твердых и расплавлен-  
ных металлов.....I31
- Слуховский О.И.  
Изучение тонкой структуры дифракционных максимумов  
расплавов Fe, Co, Ni .....I34
- Романова А.В.  
Параметры структуры ближнего порядка металлических

Расплавы и связь с кристаллическим состоянием.....136

Бухаленко В.В., Ильинский А.Г., Зелинский Г.М., Романова А.В., Шумихина В.С.

Рентгеноструктурное исследование чугунов в твердом и жидком состояниях.....143

Слуховский О.И., Персикон Э.В.

Исследование структуры упорядочивающегося сплава

$Fe - Al$  равноатомного состава в жидком состоянии...147

Романова А.В., Пригунова А.Г., Ростовская Э.А., Таран Ю.Н., Мазур В.И.

Исследование структуры и высокотемпературной кристаллизации расплавов алюминий-кремний.....149

Ниженко В.И.

О косвенной оценке структуры жидких металлов.....153

Еланский Г.Н., Кудрин В.А.

Связь процесса обезуглероживания со строением и свойствами расплавов на основе железа.....156

Ломов А.Л.

Определение парциальных давлений паракомпонентов двойной системы из общего и индивидуальных давлений пара в случае бездиссоциативного испарения вещества.....159

Лысов В.И., Руцешо А.Г., Цыганов Н.Л.

Уравнение состояния для щелочных жидких металлов и сравнение его с экспериментальными данными в широкой области изменения температуры и давления.....162

Мудрый С.И.

Характер межатомного упорядочения в расплавах тройных систем  $Pb - Te - Bi$  .....166

Масленников Ю.И.

К методике определения параметров ближнего порядка из экспериментального структурного фактора.....168

- Дамсонов В.М., Щербаков Л.М.  
Расчет поверхностной энергии металлических расплавов на основе метода вспомогательного поля.....171
- Казимиров В.П., Шовский В.А., Баталин Г.И., Соколовский В.Э., Соловьян А.М.  
Рентгенографическое исследование строения расплавов системы  $Ni - Ge$  и  $Co - Ge$  .....175
- Дутчак Я.И., Клям Н.М., Мудрый С.И.  
Структурные особенности расплавов эвтектических систем с перегибом на линии ликвидуса.....179
- Бородулин Е.К., Попова Э.А., Михайликов С.В., Шаповалова Т.И.  
Связь равновесной термодинамической активности продуктов раскисления жидкой стали с фактическим содержанием в ней неметаллических включений.....181
- Фролов А.А.  
Интерпретация структуры ближнего порядка в расплавах..185
- Семенов В.Р., Фролов А.А., Петрушевский М.С.  
Структура расплава и строение межфазной границы кристаллов.....188
- Бушманов В.Д., Яценко С.П.  
Исследование областей раскисления в системе щелочные металлы - Р элементы III группы.....191
- Курев А.А.  
Вычисление электронных свойств жидких металлов с использованием методов функций Грина и псевдопотенциала.195
- Гельчинский Б.Р., Савченко В.Д., Ватолин Н.А.  
Вычисление магнитной восприимчивости металлических расплавов с привлечением метода псевдопотенциала.....198
- Гельчинский Б.Р., Монькин В.Д., Дроздов В.Г.

Анализ факторов, влияющих на расчет электросопротивления в приближении метода псевдопотенциала.....	202
Бескачко В.П., Лысов А.А. Вычисление термодинамических свойств жидких металлов методом псевдопотенциала.....	206
Сермягин В.Н., Пастухов Э.А., Керн Э.М. Рентгенографическое изучение строения алюминиево-кремниевых расплавов.....	209
Сермягин В.Н., Барышников Г.П., Пастухов Э.А., Ватолин Н.А. О перспективах применения метода "температурной" обработки сплава Al27-I в жидком состоянии.....	213
Попова Л.А., Попель С.И., Масленников Ю.И. Электроннографические исследования строения расплавов системы - .....	216
Шебзухов А.А., Кожокова Ф.М., Карачаева А.М., Осико Т.П. Теоретические расчеты составов переходных слоев в двухкомпонентных системах и нанесение результатов на фазовые диаграммы.....	219
Масленников Ю.И., Зотеева Н.Н. Строение свинцово-оловянных расплавов.....	224
Алексеев Ю.С., Левин Е.С. Расчет удельного электросопротивления бипарных расплавов хрома и марганца с германием по экспериментальным структурным факторам.....	228
Вяткин Г.П., Ухов В.Ф., Чистяков В.Ю. Об одном эффекте применения потенциала Стиллинджера в машинном эксперименте для расплавленных солей и окислов.....	230



Соловьев Р.Е., Рябухин А.Г., Фатеев Ю.Ф. Кинетический метод определения равновесного потен- циала.....	232
Рябухин А.Г. Расчет свободной энергии разложения расплавленных солей по термическим константам ионов в водном рас- творе.....	235
Рябухин А.Г. Стандартная свободная энергия образования ионов метал- лов в расплаве собственной соли.....	238
Хохлов С.Ф. Аморфная структура как "возбужденное" состояние крис- таллов.....	241
Пастухов Э.А. Исследование структурных характеристик жидкостей дифракционными методами.....	245
Красный Ю.П., Коваленко Н.П. К теории рассеяния рентгеновских лучей в жидких ме- таллах.....	251
Назаренко В.И., Полухин В.А. Исследование структуры и динамики жидких металлов методом машинного моделирования.....	253
Полухин В.А., Назаренко В.И. О масштабе когерентности и функциях рассеяния в жид- ких металлах.....	257
Бескавио В.П. Метод регуляризации для интерпретации данных дифрак- ционных экспериментов.....	260
Дзугутов М.М., Полухин В.А., Ухов В.Ф. Расчет структурных свойств жидкого алюминия методом молекулярной динамики.....	263

Михальчук В.И. Моделирование атомной структуры жидкого теллура.....	266
Гаврилин И.В., Ершов Г.С. К обоснованию модели микронеоднородного строения ме- таллических расплавов.....	270
Галашев А.Е., Байдаков В.Г., Скрипов В.П. Термические и механические свойства кристаллов вбли- зи линии плавления (машинный эксперимент).....	275
Митько М.М., Чегодаев А.И., Сафонов С.П. Расчеты поверхностного натяжения и давления пара в металлических расплавах на основе платины.....	278
Киташев А.А., Лепинских Б.М. Расчет растворимости кислорода в жидких металлах.....	283

## Тезисы научных сообщений

III Всесоюзной конференции по строению и свойствам  
металлических и шлаковых расплавов

Ч. I ТЕОРИЯ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ И  
ДИФРАКЦИОННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

(22-23 сентября)