**Кадыров, Руслан Илович.**  
Термодинамические и динамические свойства металлов и сплавов в методе модельного функционала электронной плотности : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Томск, 1999. - 119 с.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Кадыров, Руслан Илович

Введение

I. Методы расчета термодинамических характеристик металлов и сплавов и нелинейные эффекты при высокоэнергетических воздействиях

1.1. Поверхностная энергия чистых металлов и сплавов

1.2. Структурные и термически активируемые точечные дефекты в сплавах

1.3. Нелинейные эффекты при высокоэнергетических воздействиях на материал

1.4. Метод модельного функционала электронной плотности

II. Расчет поверхностной энергии металлов и сплавов в рамках метода модельного функционала электронной плотности

2.1. Поверхность металлического сплава

2.2. Расчет поверхностной энергии в рамках метода модельного функционала электронной плотности

2.3. Поверхностная энергия металлов

2.4. Поверхностная энергия упорядоченных сплавов

III. Методика расчета свойств структурных и термически активируемых дефектов в рамках метода модельного функционала электронной плотности

3.1. Модель расчета свойств термически активируемых вакансий в сплавах

3.2. Модель расчета характеристик структурных дефектов в сплавах

3.3. Результаты расчета энергии и объема образование термически активируемых вакансий в сплавах NiAl и Ni3A

3.4. Результаты расчета энергии и объема образования структурных дефектов в сплавах NiAl и Ni3AI

3.5. Термически активируемые точечные дефекты в сплавах NiAl и Ni3AI

V. Моделирование поведения материалов при высокоэнергетических оздействиях с использованием многочастичных межатомных отенциалов

4.1. Отклик материала со свободной поверхностью при высокоскоростном механическом нагружении

4.2. Формирование уединенных волн при локальном импульсном разогреве металла со свободной поверхностью ^

4.3. Особенности распространения уединенных импульсов в разогретом кристаллите лючение сложения шожение А шожение В

4СОК литературы