**Курлов, Сергей Павлович.**

## Прогнозирование структуры и физико-химических свойств полимеризованных оксидных расплавов методом Монте-Карло : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Свердловск, 1984. - 150 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Курлов, Сергей Павлович

В в е д е н и е

I. Литературный обзор (состояние вопроса)

1.1. Методы оценки энергии межчастичного взаимодействия.

1.2. Способы оценки структуры в оксидных расплавах .х^

1.3. Модель самопроизвольного формирования структуры расплава. Выбор метода расчета

1.4. Выбор объектов исследования .х

В ы в о д ы.

П. Методика компьютерного эксперимента

2.1. Общие принципы метода

2.2. Блок-схема программы

2.3. Тестирование программы

2.4. Погрешность расчета

В ы в о д ы.

Ш. Расчет энергии межчэстичного взаимодействия в оксидных расплавах с различными анионами-сеткообразователями.

3.1. Расчет энергии межчастичного взаимодействия в силикатных анионных группировках различной степени сложности

3.1.1. Тетраэдр 8\*1)4"

3.1.2. Влияние двусвязэнных атомов кислорода на энергию этомизэции тетраэдра

0 (2п«-2У

3.1.3. Энергия атомизации в ленточных анионах типа ог^О^и)

3.1.4. Энергия атомизации в кольцевых анионах

3.2. Расчет энергии атомизации различных структурных группировок в оксиде алюминия

3.2.1. Группировки с одним атомом алюминия

3.2.2. Группировки с двумя атомами алюминия

3.2.3. Координация алюминия в ионных группировках

3.3. Оценка форм существования боратных группировок по энергиям межчастичного взаимодействия

3.3.1. Энергия связи в простейших боркисдородных группировках

3.3.2. Варианты четверной координации в борнислородных анионах

3.3.3. Равновесие боркислородных анионов, находящихся в тройной и четверной координэциях .'.'.

3.4. Оценка энергий межчастичного взаимодействия в ванадий-кислородных группировках переменного состава. 53 В ы в о д ы

IV. Расчет свободной энергии смешения и структурных образований в оксидных расплавах методом Монте-Карло

4.1. Система СэО

4.2. Система Са0-А

4.3. Система Са0-В

4.4. Система СаО- У^О^

В ы в о д ы.

V. Расчет активностей компонентов расплава методом машинного эксперимента

5.1. Методы расчета активностей компонентов в оксидных расплавах.

5.2. Вывод расчетных уравнений для определения активностей компонентов в оксидных системах

3.3. Расчет активностей компонентов оксидных расплавов из избыточной энергии смешения методом засечек

3.4. Активности компонентов в системе СаО- Si О2.

5.5. Система Сэ0-А

5.6. Система СаО^О^ .уу

5.7. Система СаО- V^

В ы в о д ы

У1. Сопоставление структуры и физико-химических свойств оксидных расплавов, содержащих различные компоненты сеткообразователи

6.1. Сравнение энергетических параметров различных компонентов-сеткообразователей

6.2. Влияние иона .-сеткообразователя на структуру и термодинамические свойства оксидных расплавов

6.3. Влияние иона-сеткообразователя на адсорбцию кислорода и строение поверхностного слоя оксидных расплавов

В ы в о д ы.