

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>
УДК 669.88:537.562. Поступила в редакцию 10 декабря 2011 г.

Молекулярно-динамический анализ структуры жидкого ниобия с примесью атомов железа и водорода

© **Пастухов Эдуард Андреевич, Востряков Андрей Алексеевич,***
Сидоров Николай Иванович⁺ и Ченцов Виктор Павлович

*Лаборатория физической химии металлургических расплавов. Институт металлургии УрО РАН.
ул. Амундсена, 101. г. Екатеринбург, 620016. Россия. Тел.: (343) 267-88-93. E-mail: nik@imet.mplik.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *ближний порядок, молекулярная динамика, ниобий, подвижность водорода, диффузия, функция радиального распределения, расплав.*

Аннотация

Методом молекулярно-динамического моделирования оценены коэффициенты диффузии водорода и железа в расплавах ниобия. Результаты сопоставлены с литературными данными по удалению примесей при плазменно-дуговом переплаве ниобия с применением водорода, а также при вакуумно-дуговом переплаве. Оценена доля участия электрического поля в процессе удаления железа.