


Организовано при поддержке
Российского Фонда Фундаментальных Исследований
(РФФИ, проект № 20-02-20007)

УРАЛЬСКАЯ ЗИМНЯЯ ШКОЛА
ФИЗИКОВ-ТЕОРЕТИКОВ

«КОУРОВКА»

60 лет «Коуровке»
110 лет со дня рождения С.В. Вонсовского



Екатеринбург
2020

**Международная зимняя школа физиков-теоретиков
«КОУРОВКА-XXXVIII»**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

«Гранатовая бухта», Верхняя Сысерть,
23 – 29 февраля 2020 г.

г. Екатеринбург
2020 г.

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

- Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН
- Институт электрофизики УрО РАН
- Уральское отделение Российской Академии наук
- Некоммерческое партнерство «Региональный научно-технический центр»

КОНФЕРЕНЦИЯ ПРОВОДИТСЯ ПРИ ФИНАНСОВОЙ ПОДДЕРЖКЕ

- Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
- Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН
- Уральского отделения Российской Академии наук
- Российского Фонда Фундаментальных Исследований (РФФИ, проект № 20-02-20007)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель программного комитета

Садовский Михаил Виссарионович (*академик РАН, ИЭФ УрО РАН, Екатеринбург*)

- Борисов А.Б. (*член-корреспондент РАН, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Воловик Г.Е. (*д.ф.-м.н., Институт теоретической физики РАН имени Л.Д. Ландау; Лаборатория О.В. Лоунамаа, Университет Аалто, Финляндия*)
- Рубцов А.Н. (*д.ф.-м.н., Российский квантовый центр, Москва*)
- Ирхин В.Ю. (*д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Некрасов И.А. (*член-корреспондент РАН, ИЭФ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Хомский Д.И. (*профессор, Кёльнский университет, Германия*)
- Шавров В.Г. (*профессор, Институт радиоэлектроники РАН, Москва*)

ОРГКОМИТЕТ

Председатель оргкомитета

Меньшенин Владимир Васильевич (*д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)

- Чарикова Т.Б. (*д.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Кудряшова О.В. (*к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Зарубин А.В. (*к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Бахарев С.М. (*к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Игошев П.А. (*к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Агзамова П.А. (*к.ф.-м.н., ИФМ УрО РАН, Екатеринбург*)
- Павлов Н.С. (*к.ф.-м.н., ИЭФ УрО РАН, Екатеринбург*)

Сайт: <http://conf.uran.ru/Default?cid=kourovka>

E-mail: kourovka@imp.uran.ru

ISBN 978-5-9500855-9-8

Трехчастичные корреляции в жидком и аморфном алюминии

Б.Н. Галимзянов^{1,2*}, А.В. Мокшин^{1,2}¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия²Удмуртский федеральный научный центр УрО РАН, Ижевск, Россия*E-mail: bulatnmail@gmail.com

Трехчастичные корреляции оказывают существенное влияние на различные процессы, протекающие в конденсированных средах. Учет трехчастичных корреляций необходим, например, для объяснения динамической неоднородности в жидкостях, для описания транспортных свойств в химических реакциях, для описания процесса аморфизации жидкостей при быстром охлаждении [1,2]. Прямая оценка трехчастичных корреляций экспериментальными методами является чрезвычайно сложной задачей. Подробную информацию о трехчастичных корреляциях можно получить на основе данных моделирования атомной/молекулярной динамики [3].

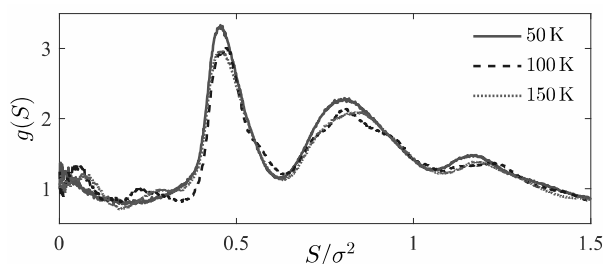


Рис. 1. Трехчастичная корреляционная функция $g(S)$, полученная для аморфного алюминия при температурах 50 К, 100 К и 150 К.

В настоящей работе на основе данных моделирования атомной динамики выполнен анализ трехчастичных корреляций в жидком и аморфном алюминии [4]. Введена трехчастичная корреляционная функция $g(S)$ для характеристики относительных положений различных трех атомов – триплетов с площадью S . Обнаружено, что в случае жидкого алюминия с температурами 1000 К, 1500 К и 2000 К трехчастичные корреляции более выражены в пространственных масштабах, сравнимых с размером второй координационной сферы. В случае аморфного алюминия с температурами 50 К, 100 К и 150 К корреляции во взаимном расположении трех частиц проявляются вплоть до пространственных масштабов, которые сопоставимы с размером третьей координационной сферы (см. рис. 1). Показано, что временная зависимость трехчастичных корреляций в этих системах воспроизводится с помощью интегро-дифференциального уравнения типа обобщенного уравнения Ланжевена [5]. Здесь наблюдается соответствие между теоретическими результатами и нашими данными моделирования атомной динамики.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-12-00022).

1. M. Tokuyama, *Physica A* **378**, 157 (2007).
2. O.S. Vaulina, O.F. Petrov, V.E. Fortov, A.V. Chernyshev, A.V. Gavrikov, O.A. Shakhova, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 035004 (2004).
3. S. Gupta, J.M. Haile, W.A. Steele, *Chem. Phys.* **72**, 425 (1982).
4. B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin, *Physica A* **478**, 103 (2017).
5. A.V. Mokshin, *Theoret. Math. Phys.* **183**, 449 (2015).