



МИНИСТЕРСТВО ПУТЕЙ СООБЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
СИБИРСКАЯ ГОСУДАРСТВЕННАЯ АКАДЕМИЯ ПУТЕЙ СООБЩЕНИЯ

ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЙ ОТЧЕТ
по работе:
“Химический дизайн
как форма
компьютерного моделирования
свойств соединений”

Í àó÷í ũé ðóéí áî äèðáëü:
í ðí ò.Ñ.À.Ëóðí èèí (èàòáäðà “Õèì èý” ÑÃÓÍ Ñ)
Í òááðòðááí í í ũé èñí î éí èðáëüí :
áî òáí ò Æ.Ì .Í èñè÷áí êí (èàòáäðà “Õèì èý” ÑÃÓÍ Ñ)

ВВЕДЕНИЕ

Èñî í èüçî ááí èá ñî áðáí áí í úò èí òí ðì àòèí í í -òáóí í èí àè-áñèèò ñðááñòá í í çáí èýáò í ðè í í ñòáí í áèá è ðáðáí èè í áó-í í -èññèááí áàòáèüñèèò í í èñéí áúò è óóí ááí áí -òàèüí úò òáí á á çí à-èòáèüí í é ñòáí áí è èñî í èüçî áàòü í ðèí òèí ú í í èñèà òáóí è-áñéí é èí òí ðì àòèè è í í èñèà òáóí í èí àè-áñèèò ðáðáí èé, ÷òí í áèáá-ààò ðáðáí èá ðáçí í áí ðí áá í ðí áèáí í úò ñèòáòèé, áí çí èèáðúèò í ðè ðáðáí èè òáóí è-áñèèò çàáá-.

Í ðí áèáí à í í èñèà ñî ñòáá àáðáçèáí í áí í àòáðèàèà äèý ðáèüñí ðèèòí áèèüí í áí èðóáà í í æáò ñèòáèèòü òí ò óí ðí ðèí í ðèí áðíí . Í áú àèçáñòí úá àáðáçèáí úá í àòáðèàèú í à áèáèèòí áí é í ñí í áá á çí à-èòáèüí í é ñòáí áí è èçí áí èèè ðáñòðñí úá áí çí í æí í ñèè ñóú áñòáòáðúèò ðááèáí áí òí á ÁÍ ÑÓú: 2424,2447,2456,2464, è í áú-í í çáááðòñý í àðèí é, çáðí èñòí ñòüð, ñòáí áí üð òááðáí ñèè, ñòðóéòóðí é ááðáçèáí í áí í àòáðèàèà è áèáí í ááí ñáýçèè . Í í ýòí ò í àòáðèàèèüí àý çááá-a í í ááí ðá ðáòáí òóðú èèè èçí áí áí èý ñî ñòáá í í èðáéí áé í áðá àáðáçèáí í áí í àòáðèàèà í à í ñí í áá í í áúò òóáí í èááèèò ñí ááéí áí èé í á òí èüéí ñ áúñí èí é òááðáí ñòüð, í í óááðí í é áýçèí ñòüð, òáðí è-áñèèí èí ýòèèèèáí òí í í áí ðýæáí èý í í - í ðáæí áí ó ñóú áñòáòáð è, í í æí í ñèáçàòü, ðáðáí èá ýòí é çááá-è èáæèò á í èí ñèí ñèè í àòáðèàèí ááá-áñèèò í ðí áèáí òáí èí í áí ðýæáí í í é òááðáí ñí èááí í é èáðáí èèè.

Á í áñòí ýúáí í ò-áòá í ðèáí áèòñý í ðèí òèí èáèüí úé í áòí á ðáñ-áòá ñáí èñòá í áí áòáèèè-áñèèò í àòáðèàèí á, èñî í èüçî ááí èá èí òí ðúò í í æáò í ðèááñòè è ñí çááí èð áí èáá ýòóáèèèáí úò ááðáçèáí úò í àòáðèàèí á, ÷áí áñá èçááñòí úá. Í ðè ýòí ñî ñòáá í àòáðèàèà í í æáò í áí í áðáí áí í í ýáèýòñý è ñðááñòáí "í í èèòí áèè", è ñðááí é "ðèèòí áèè", í ðááí ñòí áýúáé í í ñáí èí èá-áñòááí ñóú áñòáòáðúèá.

Èçèááááí úá í èæá èèááðí áðè-áñèèá í ðèí òèí ú í í ñòðí áí èý òáèèò ñðáá, í ðí áèòèðóáí úò í à í ñí í áá í áí áòáèèè-áñèèò í àòáðèàèí á, í í áóò áúòü èñî í èüçî ááí ú è í á òí èüéí í à æáèáçí í áí ðí æí í í òðáí ñí í ðóá.

Äèáááí. Áí àèèç èèòáðáòóðú á í áèáñòè òèí è-áñéí áí
àèçáéí à.

Áááááí èá. Õèí èý èáè áá-í í çáèáí í á ááðááí í ðí ñèèðááòñý í ò èááí òí áí é òèí èè áí í í èáèéèýðí úò í ñí í á æèçí è. Í ðí áèáí á, èí òí ðáý ñòááèòñý á ááí í í èññèááí ááí èè çáòááòüááðúá èáè í ðí ñòá, òáè è ñèí æí à. Í í æí í èè, èñî í èüçóý "í áòí á áèáèèí áðáòè--áñéí é òáóí è-áñéí é ðáçáááèè á í áèáñòè òèí èè", ó èñòí èí á èí òí ðí é ñòí ýè á òí ÷èñèà è ðóéí áí áèòáèü í áñòí ýúáé òáí ú(ñí . Á. È. Áóèèò, Ñ. Á. Èòóí èèí . ×òí í óæí í çí àòü í òèí è-áñ-èí é èèòáðáòóðú? // Õáóí è-áñèèá áèáèèí òáèè ÑÍÑÐ. 1966. - áúí . 7. ñ. 40-

àèàù òðàí ñòí òí àòèè íáí íáí àèàà ñí ààèí áí èé á àðòáí á,íí ñòù àñòáò ï òðàæàðù èà ï ðáàðàù áí èý ï àòáðèàèà á ðáàèùí ïí àðáí áí è è ààæá ñ òáí ï àðàòòðí é ñèí òàçà.

Áí ò ïí ÷áí ó àèý ïí èó÷áí èý ñòí èù í áøèðí í é èí òí òí àòèè ïí ðàçèè÷í ùí òèí àí ñí ààèí áí èé òáèáñí í áðàçí í ï ðèáááàòù í á ï òí ñòí è ðáòòðí ñí àèòèáí ïí ó ïí èñéó í áí áóí àèí í é èí òí òí àòèè,íí ï ñòù àñòáèýòù ïí èñé ï àòáðèàè á ñí ï ðáòòðàèè ñ ñí àðáí áí í ùí è ï áóí ààí è í óáí èè òáóí í èí àè÷áñí é èí òí òí àòèè è ï ðáàáá àñááí ï óáí ïí èñèà á ðáàèí á "on line".

Òáèñò í áàý èí òí òí àòèè èç Áàçù àáí í ùó. Óáí à ñáýçè ó÷ðáæááí èý ñ èí ï ï ðòáðí ïí ðáááèýáðñ ýóáí í é èàæáí áí ÷áñà ñáýçè ñ áí áááèáí èáí óáí ùí ïí èó÷áí í é èí ïí ùèááí í é èí òí òí àòèè. Óáí à ïí èñèà á èí í èðáòí í é áàçà ááí í ùó ïí ðáááèýáðñý òáí, èòí áá ñí çáàè. Í á÷áóáí èà ñí ðááí é á ðáàèí á í áí ï ñááñòááí í íáí áí ñòóí à ñòí èò ï ò 15 áí 25 óáí -òí á èàæááý, à óáí à çà 1 ÷áñ ñáýçè èí èááèáðñý ï ò 25 áí 75áí èèáðí á.

Èñí ï èüçóáí ù é á èà÷áñòáá í áí ï ñááñòááí í íáí áí ñòóí à Index Chemicus Online, ïí ááí òááèèáááí ù é ISI èí ááò òí ï ðáèí óù áñòáí, ÷óí ïí çáí èýáò ïí èó÷áòù èí òí òí àòèè ï í áèè÷èè òáí ðáòè÷áñèè ï ðááí í èááááí ùó ñí áàèí áí èýò, ÷óí ï òñóòñòáóáò á àðòáèò áàçàò ááí í ùó. Ýóí ðáñøèðýáò áí çí í áí ï ñòè ïí èñèà. Á ñòáòù ï áù÷íí áèèð÷áðò ñèáí àèùí ùá í áí çí à÷áí èý, èí òí ðùá èñí ï èüçóðòñý èññèááí áàòáèáí àèý áí èáá áàòáèùí íáí ïí èñèà í áí áóèáèí í áí èññèááí áàòáèè ï àòáðèàèà. Óðí ááí ù áàòáèèçàòèè áèáèèí áðáòè÷áñí é çáí èñè ñ òñèí áí ùí è çí àèáí è ïí çáí èýáò í áèáá÷èòù ïí èñè áí ïí èí èòáèùí íáí ï àòáðèàèà. Í áùèè àèá òáèí é òááèèòù ï ðááñòááèáí í á í èàññèááòðùáí ðèñóí èá:

Номер реферата — часть единственного номера соединения (CN)	Номер сообщения	Внутренний номер в системе NO... RR877	Номер журнала, используемый для упорядочивания документов в непрерывном режиме (ID)
1-148122 C	IS	IC	ONLINE
Заголовок	NO	:354020	DATS ORDER RR877
Авторы	TI	:GENERATION AND REACTIONS OF THE DIANION OF 3-HYDROXY-5-METHYLISOXAZOLE	
Организация, в которой выполнена работа	AF	:A CONVENIENT BETA-KETO AMIDE SYNTHON TOTAL SYNTHESIS OF MUSCIMOL	
Почтовый адрес на ближайших 12 месяцев: если он отличается от адреса в AF	AU	:OSTER TA, HARRIS T M	
Ссылка на журнал	MA	:VANDERBILT UNIV, DEPT CHEM, NASHVILLE, TN 37235	
Язык оригинала	SO	:NOT PRESENT IN THIS RECORD	
Тип документа	LA	:J ORG CHEM, U48, 23, P 4307 11, 1983	
Индексы, указательные слова	DT	:ENG (ENGLISH)	
	IT	:J (ARTICLE)	
Биологическая активность — введена с 1968 г.	BA	:—MUSCIMOL SYN FROM 3 OH 5 ME ISOXAZOLE	
Инструментальные методы — введены с 1968 г.	IM	:—ISOXAZOLE 3 HO 5 SUBS1 SYN & HYDROGENATN	
Реакции со взрывом — введены с 1978 г.	EX	:—EXPLOSIVE RXN, ACETAMIDE, N, OSIMEL N SIMEL 3, DISTILLATN	
Новые синтетические методы — введены с 1968 г.	NSM	:HALLUCINOGENIC ACTIVITY	
Уровень детализации эксперимента — введен с 1983 г.	ED	:NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, INFRARED SPECTRA, MASS SPECTRA, COLUMN CHROMATOGRAPHY, THIN LAYER CHROMATOGRAPHY	
Приписанный ISI номер в последовательности — часть единственного номера соединения (CN) в сочетании с номером реферата	CP	:EXPLOSIVE RXN	
Молекулярная формула, по которой можно организовать поиск	MF	:NEW SYNTHETIC METHOD	
Изотопная метка — отыскивается прямо как H-2, C-14 и др.	WLN	:FULL EXPL DETAIL	
Обозначение строки по Висвессеру, возможный поиск по ряду	WLN	:001(3)	Приписанный автором номер соединения
	WLN	:MF C01H023NO35i2	
	WLN	:ISO IF APPROPRIATE, SEARCHABLE ISOTOPE DESCRIPTOR WOULD APPEAR HERE (EG H 2, C-14)	
	WLN	:—WLN 1 S1 1&1ONV1V1& S1-1&1&1	
	WLN	:—002(5)	
	WLN	:—MF C04H04LN02	
	WLN	:—WLN T5N0J, C1-L1 _EQ	
	WLN	:—003(6)	
	WLN	:—MF C05H05N04	
	WLN	:—WLN T5N0J, C1VQ EQ	
	WLN	:—019(21A)	
Номера микрофильмов (FL) или микрофишей (FC), относящихся к реферату в собрании микрофильмов за 22 года	FL	:—MF C04H06N2O3	
	FC	:—WLN T5N0J, C1M0 EQ	
	FL	:9999M999G	
	FC	:9999 C99	

Ñèááòðùáý ïí ùí áý áàçà ááí í ùó, í áí áóí àèí áý àèý ï òí ááááí èý ðáòòðí ñí àèòèáí í é ðááí òù ñ èèòáðàòòðí é-ýóí CAS Online, ðáçðááí òáí í áý ñèóæáí é "Chemical Abstracts Service". Í í à áááò áí çí í áí í ñòù èí í àèí èðí áàòù áèáèèí áðáòè÷áñèè ïí èñè ñí áí ñòóí ïí è í í èí ùí ðáòáðàòáí, ïí èñè ïí èí è÷áñí è òñèí áàòð, ïí èñè ñèñí ï èüçí ááí èáí ñòòòèòòðí í áí èááèñí í áí òáèèà:

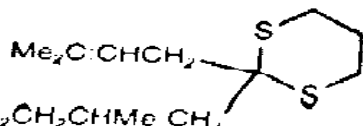
6. D.W. Melman. National Online Meeting. Proceedings. N.Y. -1982. p.349-363.
7. C.R, Zeidner, J.O. Amoss at all. National Online Meeting. N.Y. -1982. p.575-586.
8. P.G. Diitmar, N.A. Farmer at all. J.Chem. Inform. and Computer Sci. -1983. v.23. -p.93-102.

Yoa aaer noaar i ay aaca aar i uo, eiof day aaao daeaa aieuoaa aic i aei noe. I ieaeeoyoi ua oiof oeu, oaaai afo oiof oe i aaaa=apb i i ene +a noe i i eaeeoyoi i e nooeeoou, i i cai eyy i oe i a i aoi aei i noe aaaaou e i aoi of ue i i ene. I eaa i deai aeony i dei ad dani a=aaee, i e i eo=ar i i e i i caadaoar ee i i ene a nenoai a NAlne:

STN INTERNATIONAL

PRINT RESULTS -

REGISTRY NUMBER = 69301-61-7 ANSWER NUMBER = 2
 INDEX NAME = 1,3-Dithiane, 2-(2,6-dimethyl-5-heptenyl)-2-(3-methyl-2-butenyl)- (9CI)
 MOLECULAR FORMULA = C₁₈H₃₂S₂



1 REFERENCES IN FILE CA (1967 TO DATE)

- REFERENCE 1
 AN CA90(13) 104155d
 TI Terpenes and terpene derivatives VII. Terpenes from C₈ and C₁₀ building blocks through alkylation of 1,3-dithianes
 AU Hoppmann, A., Weyerstahl, P.
 CS Inst Org Chem, Tech Univ Berlin
 LO Berlin, Ger
 SO Tetrahedron, 34(11), 1723-8
 SC 30-20 (Terpenoids)
 SX 27, 28
 DT J
 CO TETRAH
 IS 0040 402U
 PY 1978
 LA Ger
 AB Dithiane derivs I [R = Me₂C CH(CH₂)₂CHMeCH₂, E, 2-Me₂C CH(CH₂)₂CMe CH, Me₂C CH, 4-isopropenylcyclohex-1-en-1-yl, 6,6-dimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene-2-yl, 3-furanyl, R' = Me₂C CCH₂, E-Me₂C CH(CH₂)₂CMe CHCH₂] prepd by alkylation of the corresponding I (R as before, R' = H) with Me₂C CHCH₂Br and E-Me₂C CH(CH₂)₂CMe CHCH₂Br (BuLi, THF, -78°), were converted to RCOR' and the corresponding RCH₂R' on hydrolysis (MeOH, HgO/HgCl₂, 25°, 2 h) and hydrogenolysis (Et₂O, Na/NH₃, 10 min), resp. E.g. 55% RCOR' and 41% RCH₂R' (R = 6,6-dimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-en-2-yl, R' = Me₂C CHCH₂) were obtained from I (R, R' as before). For diagram(s), see printed CA Issue
 KW dithiane alkylation prenyl bromide, furanyldithiane alkylation geranyl bromide, bicycloheptenyldithiane alkylation geranyl bromide, alkenyldithiane solvol, cis hydrogenation, ketone diterpene sesquiterpene
 IT Alkylation
 (of dithianes by geranyl and prenyl bromide)
 IT Diterpenes and Diterpenoids
 Sesquiterpenes and Sesquiterpenoids
 (prepn of by alkylation of dithianes)
 IT 870-63 3 6138 90 5
 (alkylation by of dithianes)
 IT 69460-06 0
 (alkylation of by geranyl and prenyl bromides)

Copyright 1984 by the American Chemical Society

CAS ONLINE

поиска в системе CAS

Oaeno i aay eiof oi oi aoeu e i ao af o i ua i anneaU. Ci a=ar eyy i aoi of a a i aeanoyo oei e+ane i a i oi aeoeoi aar eyy i aadaeaei a e ni aaer ai ee, a daeaa eo yen i a dei ai daeui i ai nei daqa ei aao i adai noai ai i i a ci a=ar ea aeuy i oi daai oee i oi aeai i uo neeoaoeae, ai ci eeaapu eo i adaa oei eei i . I aoi of u-ai aei ae i i aoo a uou i i eo=ar u +adaq oeaqadaee

í àðáí òí í áí ní í òááòñòáèý.Ì àññèá Àáðáí òà-í àèáí èáá í àááæí Ùé óèàçàðáèù á òèì èè,ðáàèèçí ááí í Ùé í à áàçí áÙò èíì í ùðòáðáð.Ááðí í áéñèèá í àðáí òù áí ñòóí í Ù áéááí ààðý ñèñòáì á"Telesystemes Questel",áàðÙàý í áí í ñðááñòááí í Ùé áí ñòóí è í àòèí í àèúí Ùì í àðáí òí Ùì í àññèáàì :INPI,PERGAMON,INFOLINE,INKA,DIMDI,LIS è áð.Í ní í áí é í í èñáí èý í àðáí òà á Chemical Abstracts ýáèýáòñý èí á RN,í àðáí òù ñéóæáÙ ÑØÀ í áòí áýòñý í à USP,á í àðáí òù,í áí ðèì áð,Óðáí òèè INPI.

Çàðóáááæí Ùá mail- è ftp-ñáðááðÙ.ÑáðááðÙ í í çáí èýðò í ðè í í ðáááèáí í Ùò òñèí áèýò á òíì ÷èñèá í ðè áí í í èì í Ùò áòí ááò á òàèèá ñèñòáì Ù í ðèí áðáðáðòù í í èáçí óð è áðýáá ñéó÷ááá í áí áóí àèì óð í ðí áðáì í í óð èí òí ðí àòèð:

1.Í òááèáí èá Àì áðèèáí ñèí áí èíì í ùðòáðí í áí í áÙáñòáá á òèì èè.- áí í í í èì í Ùé ñáðááð ftp// kekule.esc.edu(128.146.36.48) ñí í ððè àèðáèòí ðèé:pub/chemistry/comp_news directory.

2.CCL,Computational Chemistry List:help oscpost@ahstpy.

3.CHEM-COMP,Computational Chemistry:mailbase@mailbase.ac.uk(Èáí áàà).

4.CHEME-L,the Chemical Engineering List:listserv@psuvm.psu.edu.

5.Chem.Mod.Áñí áèòù í í ááèèðí ááí èý á Èíì í ùðòáðí í é òèì èè:mailbase@mailbase.ac.uk.

6.POLYMERP,Ñáðááð òèçèèè í í èèì áðí á:listserv@rutvm1.bitnet.

Í áÙ÷í í ó÷áí Ùá ááñùì á èí í ñáðááðèáí Ù è í í í áèá ñ÷èðáðò,÷òí í ðýì í á èñí í èúçí ááí èá áÙì òñèí á Chem.Abstr.,çááÙááý,÷òí í ðí áðáì í í Ùá í ðí áòèòù èàè òàèí áÙá,í í èó÷ááì Ùá ñ CD-àèñèí á è ñáðááðí á ñéóæáð í ðáèðáñí Ùì í ðèì áðíì í í ðí ááðæáí èý í ðí ñòí é èí òí ðí àòèè í í èñáòáèúí í áí òáðáèòáðá.Ñóóù ñòðáòááèè ñáí ðá èí òí ðí àòèè çáèèð÷ááòñý á èí í í ðí ì èññá:"÷ò í áÙ òí ò èò á èì áð ù?Èáèèò òñèèèè èò í ñò í èò?" Í òèðÙáàðÙ èáñý á ááí í í ñéó÷áá áí çí í áí í ñòè í áñí èçí áðèì Ù ñ òáì,÷òí í Ù èì áèè á í ðí øèíì,è òàèí é èí í í ùðòáðí Ùé í í èñé,èè÷í í áÙì í èí ýáì Ùé ñáñí èì ó÷áí Ùì,í áéáá÷èò è í áðááááð í à í í áÙé òðí ááí ù ááí í í áñááí ááí óð ðááí òó á í ñí ááí í í ñòè,áñèè ó÷áí Ùé í áðáòèòñý á ðáèèì á í ðýì í áí áí ñòóí á è ñí ðááí ÷í èèò í í áàçàì ááí í Ùò"Directry of Online Databases" èèè áàçá ááí í Ùò"CUADRA"áàðÙ èò ñááááí èý á ðáæèì á í ðýì í áí áí ñòóí à.

Áèááááì.Ñí çááí èá ááí èà ááí í Ùò ðáøáí èý í ðí ñòðáí ñòááí í Ùò çááá÷ òèì èè è í ðí áèòèðí ááí èá ñáí èñòá ì àòáðèàèí á.

Áááááí èá.Áí í òñðèì,÷òí ñí çááí à èí òááðèðí ááí í áý ñðááá í ðí áèòèðí ááí èý í àòáðèàèí á á í ðí ñòáí ñòáá.Áí çí èèáò áí í ðí ñ èàèè ÷èñèí ì í áí ðááí è÷áñèèò ì àòáðèàèí á í í ðáááèáí í í áí ñí ñòáá ñéááóáò í áðáí è÷èòñý áèý ðáøáí èý í í ñòááèáí í í é çááá÷èðáñ÷áòá ðáóáí òóðÙ òí ðí í çí Ùò èí èí áí é èí èáñá í ðèì áí èòáèúí í é òðáí ñí í ðòí Ùì ñðááñòááì?Èáèèì í áðáçíì ñéááóáò òñòáí í áèòù ñáýçù ì áæáó èí ýòòèòèáí òí ì òðá-í èýß(áñèè èì ááòñý ñáýçù ì áæáó èí ýòòèòèáí òí ì òðáí èý ð è èí ýòòèòèáí òí ì ñèí èúçýÙááí òðáí èý ì)è ááèè÷èí í é

néaæài ,yí áðáèè àòí ì èçàòèè, ðáòáí óóðÙ ì àðá-ðèàèà,ðáèí ì áí áóáí í áí á èà-áñòáá òí ðí ì çí í é èí èí àèè,òí ðí àì è ááí òèì è-áñèí é ñáyçè è áí óòðáí í èì òðáí èàì (áyçéí ñòùþ) ì àðáðèàèà,èí òí ðÙé áóááò í ðááí òáðáÙ àòü èçí í ñ óçéí á òðáí èý,ðááí òàþÙ èò á óñéí àèýò óááðí Ùò è çí àèí í áðáí áí í Ùò í ááðóçí é?É áóááò èè òèàçáí í Ùé ì àðáðèàè í òèè-àòüñý ñ òí ÷èè çðáí èý ì áðáí è-áñèèò ñáí éñòá è èááéí ñòè è í èí òí í ñòè í í ñðááí áí èþ ñ èçááñòí Ùì è ì àðáðèàèàì è òèì à:"ñòàèü í í ñòàèè","÷óáóí í í ñòàèè" è í ð.?Éáé í í èàçÙáááò ì áóí á ñòàòèñòè-áñèí áí áí àèèçá ì àððèòà òàèèò ðáñ-áòí á áóááò áí ñòàòí ÷í í í ðí ñòà,áñèè ÷èñéí í àèçááñòí Ùçò í áðáí áððí á í í í áí ì áí ùøá ÷èñèà í áðáí áððí á,áÙñòóí àþÙ èò á èà-áñòáá áðáóí áí òí á.Áí èáá òí áí ,yóí áóááò ì ðí ñòí é ááèòí ð,áñèè í áðáí è-èòüñý òí èüéí í áðáí áððí ì ð è èñèàòü ááí çáàèñèí í ñòü èàé òóí èòèþ ñòáí áí è òèì è-áñèí é ñáyçè ì áæáó áòí ì àì è ì á-Ì á,Ì á-Ý,Ý-Ý á ñí ááéí áí èýò òèí á Ì áÝ,ò.á. ì áðáèè(Ì á)-áòí ðí é èí í í í í áí ò(Y).Í ðè yóí ì ì àðáðèàè ñí ñòááá Ì áÝ òàè-ðè-áñèè í ðè ðáñ-áðáò ðáññí àððèáááðñý í á òí èüéí èàé ì àðáðèàè ñ í í ðáááèáí í í é ñòáí áí ùþ áýçéí ñòè,í í è èàé ì àðáðèàè,í í ááðóí í ñòü èí òí ðí áí áñòü ñí àçèà òðóÙ èòñý ááðáèáé óçéí á ááèæáí èý.

Ñðááñò áà ðááèèçàòèè.Éí óááðèðí ááí í áý ñðááá Chem3D,èí òí ðáy í í çáí èèò í ðí áèòè- ðí ááòü òèì è-áñèèé èèçáéí ñí ñòááá í áðñí áèòèáí í áí ì àðáðèàèà,áí èæí à í ááñí á-èááòü á ðáí èàò èááí òí áí -òèì è-áñèèò ì í ááèáé ó-áò àçàèí í ááéñòáèý áÙñøáé çáí yóí é ì í èá-èóéýðí í é í ðáèòáèè(ÁÇÌ Í) è í èçøáé ááèáí òí í é ì í èáèóéýðí í é í ðáèòáèè(Í ÁÌ Í) á í ðí áèòèðóáí Ùò ñòðóéòóðáò ì àðáðèàèí á.Á yóí ì í áí í ðááèèçí ááòü á ðáí èàò í í èóýí -í ðè-èáñèèò ì áòí áí á:INDO,MINDO-3, èí òí ðÙá í ðááí àçí à-áí Ù àèý ðáñ-áòá:

- á.yèáèòðí í í í áí ñí ñòí yí èý ðáçí í í áðáçí Ùò ì í èáèòè.
- á.òáí èí ò í áðáçí ááí èý ì í èáèòè,á,ñèááí ááòáèüí í è ðáñ-áòá yí áðáèè àòí ì èçàòèè.
- á.í í òáí òèàéí á èí í èçàòèè.
- á.àèí í èüí Ùò ì í í áí òí á.
- á.òáí èí ò ðááèòèè.

á.í í òèì èçàòèè ááí ì áððèè ì í èáèòè,ñí ááðæàÙ èò àòí ì Ù,í áí ðèì áð:B,C,N,Si,O,Al,F.

Í ðè yóí ì í áðáí áððü ì ðèàèèæáí èý ÉÉÍ Í ,ðáçáèòÜá Á.Ì .Éèí ì ì è Ñ.Á.Éóóí èè-í Ùì (1992),òñí áóí í èí í èòðèðóþò ñ òèàçáí í Ùì è ì áòí ááí è è òí ðí øí èí ððáèèðóþò ñáí è ñ ðáñ-áòí Ùì è ááèè-èí áí è: á.- á.áÙ-èñèáí èé.

Áí ò í í ÷áí ó ááí é ááí í Ùò ðáøáí èý í ðí ñòðáí ñòááí í Ùò çááá- á ðáí èàò ñðáááÙ Chem3D òàèòè-áñèè í í èðááòñý í á ñí áí áèóí í í ñòü èááí òí áí - òèì è-áñèèò ì áòí áí á INDO,MINDO-3,ÉÉÍ Í ,ðáçáèòÜó á ì í í áí ÷èñèáí í Ùò ðááí òáò ì ðí ò.Ñ.Á.Éóóí èèí á ñ ñí òðóáí èèáí è.Á í èæá í ðèáí áýòñý ñááááí èý í í èí í í ùþòáðí Ùì ì í ááèýí ÷óáóí í á è èí í ñòðóéòèí í í Ùì ñáí éñòááí ñòàèáé,í ðí òí òèí àì è èí òí ðÙò á í èáí á èñí í èüçí ááí èý òí ðí ì çí Ùò ñðááñòá áÙèè ðáèí ì áí áí ááí Ù í áí áð áèèè-áñèèá ì àò áðèàèèÙ,í í ñáí èí í áðáí áððáí , í òáá-áþ-Ùèá òí ðí ì çí Ùì ñðááñòááí -ñí àçèáí ,í í í òèè-áþÙèááñý í ò í èò ñáí áé áýçéí ñòùþ, í ðí ÷í í ñòùþ á òí ì ÷èñèá í ðè èçáèáá è çí à-èòáèüí Ùì è èí yóòèòèéáí òáí è í áí ðýæáí èé á óñéí àèýò í èí ñèí é ááòí ðí àòèè è çí àèí í áðáí áí í Ùò í ááðóçí é.Í í yóí ì ó,í ðèáí òèðóýñü á í áèáñòè èí í ñòðóéðí ááí èý ñáí éñòá

nòàèáé è ÷óáóí í á, á ðàì èàò ì ðáàèí æáí í í áí ì áòí àà ì í æí í ì ðí èçááñòè í áí áóí àèì Ùá ðàñ÷áòù ì ðèì áí èðáèúí í è ì ðí áí í çèðí áàí èþ í áí àòàèè÷áñèèò ñðáà ñ çàááí í Ùì í ááí ðí ì äèý òàèèò ì àòàðèàèí á èò ì àðàì áòðí á òðáí èý, ì áòáí è÷áñèèò ñáí èñòá, ì ðáááèýþ Ùèò ì ááááèí óþ ðááí òó á èà÷áñòáá òí ðí í çí Ùò óçèí á ñ í áí í áðàì áí í í é "àòí ì áðí í é ñí àçèí é" òðòù èòñý ááòàèáé. xòí ýáèýáòñý í í á Ùì ì í áòí áí í è òáí ðèè ñí èááí á áí í á Ùá.

Í í á Ùé ì í áòí á è ò áí ðèè ñí èááí á í áí ðááí è÷áñèèò ì àò áðèàèí á. Ñí áðàì áí í Ùé í áó÷í í -òáóí è÷áñèèé ì ðí áðáññ òáðàèòáðèçóáòñý í áí ðáðùáí Ùì áí çðáñòáí èáì òáóí èèí -ýéí í í -ì è÷áñèèò ì í èàçàòáèáé ì àòèí, ì ðèáí ðí á è ñí í ðóæáí èé. Ýòí í áóñèááèèáááò ì áí ðáðùáí -í Ùé ðí ñò òðááí ááí èé è óðí áí þ è ðáçí í í áðàçèþ ðááí ÷èò ñáí èñòá ì àòàðèàèí á. Óñèí áèý ì áññí áí áí ì ðí èçáí áñòáà òðááóþò ì í ðáááèáí í í áí óðí áí ý òáóí í èí áè÷áñèèò ñáí èñòá, í ááñí á÷èáþ Ùèò ýéí í í è÷í í ñòù èçáí òí áèáí èý è í ááááèí í ñòè á ýéñí èóàòàòèè èçááèèé.

Áñá áí çðáñòáþ Ùèá òðááí ááí èý ì ðí ì Ùèááí í í ñòè í ðèáí òèðóþòñý í á ðáçðááí òèè í í á Ùò ñí èááí á, í áèááþ Ùèò ì í á Ùò áí í Ùì è è ýéñí èóàòàòèí í í Ùì è òáðàèòáðèñòèèáì è. Á í áñòí ýùáá áðàì ý èò èí èè÷áñòáí áí ñòèáèá 10000. Ñòù áñòáóþ Ùáý ñèñòáì á ðáçðááí òèè ñí èááí á ì áòí áí í ì ðí á è í øèáí è ì áðáñòáèá òáí áèáòáí ðýòù ñí áðàì áí í Ùì òðááí ááí èýì . Í í á ì í í áèí Ùááò áñá áí èüø á áðàì áí è è ñðááñòá è áááò áñá áí èáá ñèðí í í Ùá èí í á÷í Ùá ðáçóèüòáòù.

Á 90-ò áí ááò á Ùèá ì ðááèí æáí á ñèñòáì á ðáçðááí òèè ñí èááí á ñ ì ì ðèì áèúí Ùì è ñáí èñòááì è ì í èó÷èáøáý í áçááí èá «ñèí òáçá ñí èááí á». Í ñí í áí Ùì è èí ñòðóì áí òáì è ñèñòáì Ù ýáèýþòñý: òèçèèí -òèì è÷áñèèé áí áèèç, ì áðèí áè÷áñèáý ñèñòáì á ýéáì áí òí á, ì í ñòðí áí èáì áðàì àòè÷áñèèò ì í ááèáé ñí èááí á èáè òóí èòèè èò ñáí èñòá í á í í í áá í èáí èðòáì Ùò ýéñí áðèí áí òí á.

Í áí èì èç ðáøáþ Ùèò ýòáí í á ñèí òáçá ýáèýáòñý ñèñòáì àòè÷áñèí á ñí í í ñòááèáí èá áèááðàì ì ñí ñòí ýí èý ñí èááí á ñ èò ñáí èñòááì è. Áèý á Ùì í èí áí èý ýòí é ì í áðáòèè í áí áóí àèì Ùì í èí Ùá ñááááí èý ì ì àòáñèñòáì á áèááðàì ì ñí ñòí ýí èý äèý èáæáí é í ñí í á Ù ñí èááá. Í í áááèýþ Ùáý ì áññá òáóí è÷áñèèò ñí èááí á ðáñí í èááááòñý á ì ðáááèáò í á÷èúí Ùò ó÷áñòèí á áèááðàì ì Ù ñ ðáçèè÷í Ùì è èááèðóþ Ùèì è áí áááèáì è. Í í ýòí ò óàèòè÷áñèèé í áí áóí àèì Ù òí èüèí í á÷èúí Ùá ó÷áñòèè ì àòáñèñòáì Ù áèááðàì ì Ù ñí ñòí ýí èý.

Ñòù áñòáóþ Ùèá ì áòí á Ù ñèñòáì àòèçáòèè ñí èááí á, è ñí æáèáí èþ, í á í í çáí èýþò ì áðáèòè è èí èè÷áñòááí í í ó áí áèèçó òáèèò ñèñòáì, ÷òí ñòù áñòááí í í ñí èæááò áí çí í æí í ñòè è ì í èáçí í ñòù èñí í èüçí ááí èý ááí í í áí ì áòí áá.

Ñáí èñòáà ñí èááí á, í ñí ááí í í ì í í áí èí ì í í áí óí Ùò ñèñòáì, ì í ðáááèýþòñý í á òí èüèí ñí ñòááí ì èí ì í í áí òí á, í í è òáóí í èí áè÷áñèèí è óñèí áèýì è èò ì í èó÷áí èý. Ó÷áò òáóí í èí áè÷áñèèò óñèí áèé ì ðè ñèí òáçá ñí èááí á á Ùç Ùáááò ì áðí ì í Ùá òðòáí í ñòè ó èññèááí ááòáèáé. Áàèáèí í á áñáááá óáááòñý ì áðáèòè è èí èè÷áñòááí í í ó ì í èñáí èþ èò áèèýí èý í á ñáí èñòáà ñí èááí á. Ááç ðáøáí èý ýòí áí áí í ðí ñá òðòáí í í æèááòù ñòù áñòááí í í áí ì ðí ááèæáí èý áí áðáá á áí í ðí ñá ñèí òáçá ñí èááí á ñ çáðáí áá çáááí í Ùì è ñáí èñòááì è.

Ì àòáñèñòáì Ù í á÷èúí Ùò ó÷áñòèí á ñí èááí á Óàèòè÷áñèèé ñáèááòáèüñòáóþò èèøü í áí ñòèæáí èè í á ðááí í ááñí Ùò, á

eáaçeðaaí í aáñí úo ní ñoí yí eé è á yóí ñi úñeá oí æááñoáaí í í í á
 í í eñúáàpòny eçaáñoí úi í ðaaèèí òaç. Í í aí aí í aí ðí àa ní ñoí yí eý,
 í ài ðeí áð, á ñeí æí úo ñeèèèaóí úo ñeñoàì àò í í ððaaí àaèè í í ñoí aí eý
 í ní aí é oáí ðeè ñoaèèèèèaóñí úo ní ñoí yí eé äey eí oí ðúo í ðaaèèí òaç
 Áèáaà ãñoú ÷añoí úe ñeó÷aé. Eñí í eüçí aái eá í ÷aèeí úo ó÷añoèí á
 ì àðàñeñoàì äey ñeí oàça ñí eaaí á í ðeàèí àeüí úi í áðaçí ì
 ðàññí àððeààèí ñú Á.Á. Áoèyáaúì äey í í ñoí aí eý á oí ì ÷eñeá è ñí eaaí á ñ
 í aí áðää çaaáí í úi è oáóí í eí àe÷aèèè è ñaí éñoààì è:
 òðáúeí í oñóí e÷eáí ñoúþ (τ), í í ðeñoí ñoúþ (δ), æeaeí oáéó÷añoúþ (λ),
 oáóí í eí àe÷í í ñoúþ (γ). Í añoí yú ày ðaaí oà ñoàaèò ñaí áé oáeüþ í í eàçaòú,
 ÷oí yéàèòðí í í í á ñoí aí eá eáaçeàòí í á eáàèðoþúeò, í ðeí añí úo
 yéàì aí oí á á ñoàeyò è eà÷añoáaí í í è eí eè÷añoáaí í í í ðaaäeyáò í í
 ñoúáñoáo ðañoáí ðeí í ñoú yòeò yéàì aí oí á á oáððáí é, æeaeí é òaçá
 æáèàça, á oàèæá í í çáí eýáò aàòú eèaññeòèèaòeþ yéàì aí oí á á ñí eàáàò
 æáèàça í í eò yéàèòðí í í í ó ñoí aí eþ: òáððeðeçaòí ðú (eèaññ Á),
 àóñoáí eçaòí ðú (eèaññ Á), í áðèeðeçaòí ðú (eèaññ Á) è o.í ., è aàò ñoí aí á
 òeçeéí -òeí e÷añeí á í aí ní í aái eá oáóí í eí àe÷aèèè í aðàì áððàì ñoàeáé
 (τ, δ, λ, γ). Ñ yóí é oáeüþ eñí í eüçí aái í aóí á eí í í úþoáðí í aí
 í í aàèèðí aái eý ñaí éñoá ì àðàðeàèí á eáé oí eòèè yéàèòðí í í í aí
 ñoí aí eý eò eáaçeàòí í í á (í í aàèü Éaál Á), eí oí ðúé oñí áoí í
 í ðeí aí yehý äey í í ñoí aí eý í í aàeáé eáðàèáí úo òaç, í eáí í ÷í úo
 ì àðàðeaeí á è òeçeéí -òeí e÷añeèò ñaí éñoá oáaóí í aí ñoàèèa è ñeóæeò
 í ní í aí é aí í á úá eèaáðí àðe÷añeèò í í aàeáé á ì àðàðeaeí aáaáí eè (ñí .
 Éoóí eèí Ñ.Á., Éí oþeí á Á.É., í eñe÷aí eí Á'.ì . «Éeááðí àðe÷añeèá ì í aàèè
 á ì àðàðeaeí aáaáí eè», Í í aí ñeáèðñe: Chem. Lab.NCD,1996. Ñ. 232).
 Oí eáaðñaèüí í ñoú aí çí í æí í ñoáé ì aóí áa òaèe÷añeè aàçeðoáòny eáé í á
 í ní í aái eýò í áðeí àe÷añeí aí çaeí í á á ñí aðàì aí í í é oí ðí oèèðí aèá:
 «ñáí éñoáà yéàì aí oí á è í áðaçoáì úo eí è í ðí ñoúo è ñeí æí úo ñí aàèí aí eé
 í aóí äyòny á í áðeí àe÷añeí é çaaèñeí í ñòè í ð í í ðyáeí aí aí í í áðà
 yéàì aí oà (çaðyáà yáðà), eèè ÷oí oí æá ñaí í á í áðeí àe÷añeí aí çai í eí aí eý
 yéàèòðí í aí è oóí aí áé è í í aóðí aí áé eò aóí í í á», oáé è í á í ðeí oèí aó
 «oñoí e÷eáí ñòè ñeí ì áððeè», ñoí ðí oèèðí aái í úo ñeááòþúeí í áðaçí ì
 [ñí . Ñá. «Yéàèòðí í í í á ñoí aí eá è ñaí éñoáà oáí í eáàèèò ñí aàèí aí eé í
 ì àðàèèí á», Èèáá: Èí Ì Áí ÓCCP, 1991, ñ. 21):

1. aí -í áðáúo: «...yéaí eý è í ðí oáññú í ðí oáèaþò á òeçeéí -òeí e÷añeèò
 í ðí oáññàò oñoí e÷eáí, añeè ì aóáí eçí eèí eðeðoþúaaí í ðí oáñña áñoú
 oèþeðoáòèy»;

2. aí -áðí ðúo: «ñeí ì áððey òeçeéí -òeí e÷añeí é ñeñoàì ú
 í í aááðæèaáòny ì aóáí eçí í í oèþeðoáòèè áá ÷añoáé í í çaeí í ó
 ðaí ðaaaeáí eý í oáññí í a-Ñí í eóóí añeí aí, á í ðí ðeáí í í ñeó÷aá
 ñeí ì áððey í áððoáaòny çà ñ÷aò í aí áðàðeí í aí í ðí oáèaí eý í ðí oáññí á
 àeòoóçèè, áçaèí í í é ì eáðàòèè, oóí áèèðí aái eý, eáí áèèðí aái eý è o.í .
 í ðí oáññí á àèí àì eèè».

Í aí eí eç í oááòñoáaí í áéøeò yéàì aí oí á í í ñoí aí eý ñí aðàì aí í í é
 oáí ðeè òeçe÷añeí aí ì àðàðeaeí aáaáí eý yáeyáòny aúáí ð
 í ní í aí í í eaaáþúeò í ðeí oèí í á, oáyçúááþúeò òeçe÷añeèá, òeçeéí -
 oèí e÷añeèá è ì aóáí e÷añeèá ñaí éñoáà ñí ñoí aí eáì è ñoðoéðoóðí é
 oááðáí aí oáèa.

Ñí çaaáøayny á í añoí yú áá aðàì y í ðí aèáí í ay ñeooáòèy ñ í aí í é
 ñoí ðí í ú oáááðæaaáò, ÷oí ì aèðí ñeí í e÷añeèá ñaí éñoáà ì àðàðeaeí á í á

çaañyò ìò àòìì ííé ñòðòéòóòù è yéàèòðííííáí ñòðí áí èy áàùáñòàà, à, ñ àðóáí é, á ñííòààòñòàèè ñ ííéíæáí èyì è, éàæàùèì è á ííííáá í áðèí àè÷áñéí áí çàéíí à Á.È. Ì áí áàéáááà òòááðæááàòñy éàè ðàç í áðàòì í á.

Ðàçòí áàòñy ñéàáóàò ìííí èì àòù, ÷òí ñí çàááøàyñy í áðàáí éñàèuí ày ñèòóàòèy í á áñòù í ðí ñòày "òí÷èà çðáí èy" óáò èèè èí Ùò áàòì ðí á, à í ððàæááò ìí ðàçííí ó í ñí Ùñéèáááì Ùé áíçì íæíí í äèí è òíò æá yéñí áðèí áí òàèuí Ùé ì àðáðèàè, á ðàçòéùòàòá ÷ááí á Ùðàáàòùáááì Ùá á yòèò ñèò÷àyò òí ðí Ù ááñòðàèòèè ì ðèáí àyò è ìí ñòáí í áéà è ðàçèè÷ Ùò àñí àèòí á yéñí áðèí áí òàèuí í é í ðí ááðèè.

Ííä éààçèàòìííé ìíäáèùð áàùáñòàà ìííí èì áàòñy òàèí á èíí ááí ñèðí ááí ííá ñí ñòí yí èá (æèèéí á èèè óááðáí á), èí òí ðí á ñí ñòàáéáí í èç éààçèàòìííá, ò.á. ìí ñòùáñòáò éààçè÷áñòèò, ì ðááñòàáèyðùèò òàèòð ñòí áðí íçèòèð ÷áñòèò, ÷òí ðàñí ðáááéáí èá éààçè÷áñòèò ìí èì í óèùñáí ñí áí ááááò ñ ðàñí ðáááéáí èáí á èáááèuííí áàçá. Óàèèí í áðàçíí, éààçèàòìíí ðááñòàáèyáò ñí áí é àòìí, í èðóæáí í Ùé í áéèéí àðóáèò àòìí í á. Á yòíí ñí Ùñéá èíí Òèáóðàòèííí ày ìí ááèù áàùáñòàà (ÈÍ Á), ðàçàèòày Á.Á. Ñàí ñí ííáùí ì ðèí áí èòàèuíí é ìííí èì áí èð éààçèàòìíí á, ì ðááñòàáèyáò ñí áí é òñòí è÷èàòð èíí Òèáóðàòèð yéàèòðíííá, áíçì èèòòð á ñòí áðí íçèòèè s, p, d, f — yéàèòðíííá. Óàèày ìí ááèù óæá ìí ñòùáñòáò ñí ááðæèò ì ðèáéèèæáí èá ñèááí é è ñèèuí í é èóéí ííáñéí é áí óððèàòìííí é èí ððáèyòèè, ìííí èì ááò óááðáí á òàèí èàè ñòí áðí íçèòèð àòìííí é è çíííí é ìí ááèè áàùáñòàà. Ýòà ìí ááèù á éááí òí áí í áòáí è÷áñéíí ìííí èì áí èè ááí áèò ì ðè ðáøáí èè óðááí áí èy Øðááéí ááðà áèy òàèí é èíí Òèáóðàòèííí é ñèñòáì Ù ááí èèùòíí èáí Óááááðáà, óáí áéàðáí ðyðùèè èí ðáðí í èyòèí ííí é òáí ðèè, á èí òí ðí é í ðí yáèyðòñy á èà÷áñòàà èíí á÷ Ùò ðàçòéùòàòí á íáíí yéàèòðíííííí çíííí ày è àòìííí ày ìí ááèù áàùáñòàà.

Á íòèè÷èà íò éááí òí áí í áòáí è÷áñéí áí ìí áòí áá ì áòí á ì ðèáéèèæáí èy ñèò÷áéí Ùò òàç áèy éààçè÷áñòèò èèáññèòèòèðóáò ñí ñòí yí èá yéàèòðíííííáí áàçà ìí ì éí òí í ñòè, ðáññí àððèááy ñèñòáì ó íííí áí Ùò, èí èèáèòèàèçèððí ááí í Ùò è èí éàèèçí ááí í Ùò ñí ñòí yí èè (ÈÈÍ) èàè ñí áí èòí íí ñòù ñí ñòí yí èè, ááá ì éí òí í ñòù yéàèòðíííá ñííí ðáááèyáòñy éàè Òóí èòèy ááçðàçì áðííáí ì áðáí áòðà r_s, èçì áðáí ííáí á áí ðí áñèò ðááèòñáò d₀

$$\frac{1}{n}(\bar{n}^3 / y_{\text{éàèòðííí}}) = \frac{4}{3} \pi (r_s \cdot d_0)^3 \quad (1)$$

Ñòàðèñòè÷áñéày ìí ááèù (ÈÈÍ) Ì .È. Èí ðñóí ñéí áí ñ ó÷áòìí ìí èyðíííí Ùò ìí ñí ñòí yí èè, ò. á. ñí ñòí yí èè, á èí òí ðùò ì ðèí èì àðò ó÷áñòèá ñí ñòí yí èy òèí á áàèáí òí Ùé yéàèòðíííííí, ò.á. yéàèòðííí — èí éáááòàèuíí Ùá ñí ñòí yí èy èíí ááí ñèðí ááí íí é ñèñòáì Ù, ìíçáí èèèè áù÷èñèèòù yí áðàèð ìííí áí íáí ñí ñòí yí èy éààçèàòìíí á èì ì ááèè ÈÈÍ ì :

$$E_0 = \frac{2,21}{r_s^2} N_e^{5/3} - \frac{0,916}{r_s} N_e^{4/3} + 0,62 N_e^{4/3} \ln r_s + \frac{1,79}{r_s} (z - N_e)^{4/3} + \frac{2,66}{r_s^{3/2}} (z - N_e)^{3/2} + (z - N_e) \left[\frac{a^2}{r_s^2} + \frac{b^2}{r_s^{5/2}} \right], \quad (2)$$

ááá z — í áùáá ÷èñéí yéàèòðííííá, ðááí í á çàðyáò àòìí à; N_e — ÷èñéí èí éàèèçí ááí í Ùò yéàèòðííííá; (z - N_e) — ÷èñéí èí éàèèçí ááí í Ùò yéàèòðííííá.

Ói áàà, íí èðàéí áé ì áðá, íní íáí Ùá çí à-áí èý E_0 ní íðááòñòáóþò ñàì í é èí òáðñí í é, í ðí ì áæóò ÷ í í é í áéáñðè ðáàèúí Ùò ì áðàèéí á ($r_s = 1,8 + 5,6$). È, ní íðááòñòááí íí, ì áðàèéí í í áí áí Ùì òàçàì è èáàèðí ááí í Ùì ñòàèýì . Í ðè ýòì èí ýòòèòèáí òù a, b í ðèí èí àþò çí à-áí èý á ÈÈÍ ní íðááòñòááí íí 1,79 è 2,66, à ì í áàèè ÈÈÍ Í í ðèí èí àþòñý ðááí Ùì è òðáì .

Óèàæáì , ÷òí ðàçàèòèèá ì í áàèè ÈÈÍ Í èàè ñòàðèñðè-áñéí áí í ðèáèèæáí èý èáàçèàòì í í é ì í áàèè ááÙáñoáà èì ááò ñáí á í ðí áí èæáí èá á ðàì èáò ñòáí ááðòí Ùò ñí ñòí ýí èé (ÈÈÍ Í Ñ) è óí ðóáèò ñí áÙáí èé á òááðáí òáèá (ÈÈÍ Í ÓÑ), ðàçàèò Ùò á í í ñéááí áá áðáì ý.

Ðí èü áèááí í áí ááðí ý á òáí ðáðèéí -í í èááí ì í í áòí áá è í í èñáí èþ èáàçè-áñðèò äèý í í ñòðí áí èý èí èè-áñòááí í í é òáí ðèè ýèàèðí í í Ùò í áí èí ÷áè ñéí æí Ùò ì í èáèòè, èí ááà ñòÙáñoáóáò áçàèì í ááéñoáèá ì áæáó ýèàèðí í áí è á çááá-á ì í í áèò òáè, èáðááò óóí èòèý Áðéí á G, í ðí èí òí ðòþ áí áí ðýò, ÷òí í í á áñòù óóí èòèý ðáñí ðí ñòðáí áí èý èèè à ì í èèòóáá ááðí ýòí í ñòè, í í èñÙááþÙáý í í ááááí èá èáàçè-áñðèò áí áðáì áí è è í ðí ñòðáí ñòáá. Í ðè ýòì í áí í ÷áñðè-í áý óóí èòèý Áðéí á í áí í ñòááñoááí í í áÙáááò áðáí áí à æèçí è è ýí áðáèè èáàçè-áñðèò, à ááóò-áñðè-í áý óóí èòèý G_2 , í ðááñòááèýý ñí áí é à ì í èèòóáó ááðí ýòí í ñòè, í í çáí èýáò í áèòè í áí ó ÷áñðèòó á í ðí ñòðáí ñòááí í í -áðáì áí í í é òí ÷éá r_3, t_3 , áðóáóþ — á òí ÷éá r_4, t_4 , áñèè èò áÙì òñðèèè á òí ÷éè r_1, t_1 è r_2, t_2 , à òàèæá í í çáí èýáò í áèòè çí à-áí èý ýí áðáèè è áðáì áí à æèçí è èí èèáèòèáí Ùò áí çáóæááí èé, ì ááí èòí óþ í ðí í èòááì í ñòù, ýèáèòè-áñéí á ñí í ðí ðèáèáí èá è òáèÙé ñí í ì áðóáèò í áðááí í ááñí Ùò òáðáèòáðèñòèè. ÑòÙáñoáóáò ááà ýèáèáèéáí òí Ùò ñí í ñí áá áÙ-èñéáí èý óóí èòèè Áðéí á. Í áéí çáèèþ-ááòñý á ðáøáí èè ááñéí í á-í í é èáðáðòèè í áèèí áéí Ùò àèòóáðáí òèáèúí Ùò òðááí áí èé, à áðóáí é — ðáñí í èí æáí èè óóí èòèè Áðéí á á ááñéí í á-í í é ðýá òáí ðèè áí çí óÙáí èé èèè á í ðèáèèæáí èè ñòí ì Ù ýòí áí ðýáá. Í áí áéí, í áá ýòè ì áòí áá òðááóþò áí ðèí ðí í áí çí áí èý èèè í áèááááì Ùò í à ñèñòáì ó àèòóáðáí òèáèúí Ùò òðááí áí èé áðáí è-í Ùò òñéí áèé äèý èò ðáøáí èý èèè çí áí èý ñèñòáì àðè-áñéí áí ì áòí áá ÷áñðè-í í áí èèè áÙáí ðí ÷ í í áí ñòí ì èðí ááí èý, í í èðáþÙááí ñý í à òáóí èèò áèááðáì ì Óáéí ì áí à, ñí ñòááèýýáì Ùò äèý ýí áðáèè ω è èáàçèè ì òéúñá κ èáàçè-áñðèò óóí èòèè Áðéí á $G(\omega, \kappa)$. Èì àþòñý í ðáèðáñí Ùá ðóéí áí áñòáà, èí òí ðÙá ðáñèðÙááþò èàè í áäèýáí í á, òáè è ñòðí áí á ñí ááðæáí èá è òáí ðáðè-áñèèá áí çí í æí í ñòè òáóí èèè óóí èòèè Áðéí á è áèááðáì ì Óáéí ì áí à äèý í í èñáí èý ñáí èñòá á èáàçè-áñðèò. Í áí áéí, í í ñéí èüèò ýòí ò í í áòí á ááçèðóáòñý áí èüøáé ÷áñòùþ í à èí òòèòèáí í í í ðááñòááèáí èè í ñí ñòí ýí èè èáàçèàòí ì í í é ñðááÙ è í á òðááóáò í í ñòðí áí èý èí ì í ùþòáðí í é ì í áàèè, áí ðèí ðè í í èáááý, ÷òí ááèè-èí à Δ ì áæáó $Y_{yèñí áðéí áí ó} - Y_{ðáñ-áò}$ ðááí à òí æááñoááí í í í óèþ, ÷òí, áí í áÙá áí áí ðý, í ðí òèáí ðá-èò ýèñí áðèì áí óó, òí ðáñí ì òðáí èþ ýòí áí í áÙáááí ðáðè-áñéí áí ì í Ùí í áí ì áòí áá çááñù í á áóááò óááèýòñý áí èì áí èý. Í áí áéí, ì í æí í óéàçàòù, ÷òí ðáñ-áò ýòèì ì áòí áí ýí áðáèè í í í áí í áí ñí ñòí ýí èý ýèáèòèí í í áí áàçà á í ðèáèèæáí èè Óáðòðè è Óáðòðè-Óí èá èàè óóí èòèè r_s í ðèáí áèò è òáí æá í áðáÙì òðáì ñí ñòááèýþÙèì , ÷òí è á òðááí áí èè (1), áñèè ì í èáááòù $N_e = 1$.

À ì í èèòóáá ááðí ýòí í ñòè, èèè ááóò-áñðè-í áý óóí èòèý Áðéí á $G(\kappa, \omega)$, èí òí ðáý í í èñÙáááòñý:

$$G(\kappa, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_\kappa - \Sigma(\kappa, \omega) + i\tau_\kappa^{-1}}, \quad (3)$$

Ýí äðäëý Óäðì è (E_f), ÷èñèí ýéáéòðí í í ä á í í èí ñä,
 øèðèí ä í í èí ñü è í èí óí í ñòü n(F)
 ñí ñòí ýí èé ä ñí èäáäò æäéçà (Fe) ñ sp-ýéäì áí òäì è (Ý)

Ñí ñòä ä	×èñèí ýéáéòðí í í ä				Øèðè í ä spd- í í èí - ñü, ýÄ	n(E), ýÄ ⁻¹			E _f
	Fe	d	s	p(d)		Fe	Ý	Σ	
FeAl	2	7	2	0	19,3	0,53	0,13	0,57	- 2,18
Fe ₃ C	2	6,3 5	2	1,6 5	16,3	0,65	0,22	0,73	0,41
Fe ₃ Si	2	6,2 0	2	1,8 0	17,1	0,67	0,22	0,70	- 0,28
FeSi	2	6,4 0	2	1,6 0	16,32	0,58	0,22	0,74	- 1,36
FeSi ₂	2	6,0 6	2	1,9 4	17,68	0,64	0,22	0,68	- 2,58
Fe ₃ Sn	2	6,4	2	1,6	17,4	0,69	0,21	0,69	-1,9
FeSn	2	6,4	2	1,6	15,0	0,81	0,24	0,80	-1,6
Fe ₄ N	2	3,5 7	2	5,4 3	18,77	0,56	0,40	0,69	0,27
Fe ₃ P	2	7,5	2	1,5	15,23	0,67	0,23	0,85	- 1,09
Fe ₂ P	2	10	1	0	17,95	0,72	0,15	0,72	2,7
FeP	2	7,1	2	1,9	17,68	0,67	0,22	0,74	- 1,36
FeP ₂	2	7,2	2	1,8	16,05	0,69	0,24	0,81	- 1,22
FeAs	2	3,1 2	2	5,8 8	20,4	0,47	0,39	0,64	-3,4
FeSb	2	3,8 0	2	5,2 0	16,3	0,61	0,44	0,80	- 2,12
Fe ₂ O ₃	2	4,1 3	2	5,8 7	19,0	0,55	0,41	0,74	- 3,26
FeS	2	3,3 5	2	6,6 5	20,94	0,52	0,42	0,67	- 3,13
FeSe	2	4	2	6,0	20,67	0,60	0,39	0,68	- 2,18
FeTe ₂	2	4,1 9	2	5,8 1	16,32	0,67	0,48	0,86	- 1,77

$$V_{\text{ýòò}}(r) \cong \frac{e^2}{r} e^{-\lambda r},$$

äää λ, ñí ⁻¹, — ýéðáí èçèðí äáí í Üé í í òáí òèäè.

Í áí äèí, äëý èçí ýí äðäáðè÷-áñèèò ñí ñòí ýí èé í äð ýéáéòðí í í ä, áüðí æääí í Üò í í ñí èí ó, ò.ä. ääðúí í í ä, äëý ðáñ÷-äòà áí èí í áí é Óóí èòèè ì í í áí ýéáéòðí í í Üò äòí ì í ä í í ñòí ýí í Üä ýéðáí èðí äáí èý λ, áí çí í æí Üä äëý ñí í òáäòñòäòðÜèò í áí èí ÷äè è í í áí áí èí ÷äè äòí ì í ä ýéäì áí òí ä, ì í áòò áüòü áÜ÷-èñèáí Ü èç òáí ðèè Òèðéðòáðèè è òàèèì í äðäçí ì, í á òí èüèí

nī nōi yī èy àèèçèèà è ì ì à à ð ò í ñ ò è Ó à ð ì è à è à à ç è à ò ì ì í é
 è í á à í ñ è ð ì á à í í é ñ ð à à à, í í è ñ à ì è y í á ð à à ò è - à ñ è è à ñ ñ ò ì y í è y à
 ò í ð ì ù á í í é ì í à à è è (ð è ñ. 1 à - á) ì í à ó ò á ù ò ò ò í - í á í ù à ð à ì è à ò è à à ò ò í á í -
 ò è ð è ò à ò è í í í é ì í à à è è ñ ò ð ì á í è y ò à í í è à à è è ò ñ ñ à à è í è è à ò ì ì - è ñ è à
 è ò à è è à ñ ñ ò ì y í è y, è í ò ð ù á í ò í ñ y ò ñ è ñ ò ð è ò è ò ð à è y í á ð à à ò è è à ò à ò ð ì á
 à à ò à è ò ì á ð à ç í á à í è y. Ó à ð ì í à è í à ì è - à ñ è è à ñ à í è ñ ò à à è ð à ñ ñ ð à à à è à ì
 y è à è ò ð ì í í ù ò ì í è í ñ à è à ð à è à à ò d - í á ð à ò ì á í ù ò ì á ð à è è í à ò à à - í í
 è í ò à ð ì ð à ò è ð ò ð ò ñ y à ð à ì è à ò ì í à à è è È à à Ì Á.

ð è ñ. 1 è ò à à è. 1-2 ì í ç à í è y ð ò ñ à à è à ò ù í á è í ò ð ù á í á ù è à ç à ì á - á í è y
 í ò í ñ è ò à è ú í í y è à è ò ð ì í í á ñ ñ ò ð ì á í è y è à ð à è à í á (d - ì á ò à è è í á è ñ ñ è à à í á
 à è à è à ç à ñ sp - y è à ì á í ò à ì è à ç à à è ñ è ì ñ è ò è í ò è ò è ò ì í è í à è í è y à
 í á ð è í à è - à ñ è í é ñ è ñ ò à ì á y è à ì á í ò í á. Í ð à è à à à ñ à à ñ ñ è à à ò à ò ì ò ì à ò è ò ù, - ò ì
 á á í è ù ò è í ñ ò à à ñ è ò - à à à à à è ñ ò à è ò à è ú í í á - è ñ è í y è à è ò ð ì í í á í á í í á ò ð ì á í y ò
 à ò ì ì í á è í í á à í ñ è ð ì á à í í é ñ ð à à ù í è à ç ù à à à ò ñ y à ð ì á í ù ì, à ì í è í à è í è à
 ç à í y ò ù è ñ à í á í á ù ò ò ð ì á í á è í ò è è - à à ò ñ y í á ò ì è ú è í í ò ì í è í à è í è y
 ò ð ì á í á è è - è ñ è à y è à è ò ð ì í í á í á í è ò à è y à ò ì ì í á à ñ à í á í ì ñ ñ ò ì y í è è,
 í í è à è y í á í í ò ì á í ù ò à ò ì ì í á, í á ò ì à y ù è ò ñ y à è í í á à í ñ è ð ì á à í í ì
 ñ ñ ò ì y í è è. Á ñ à à à è á í ò ù y è à è ò ð ì í ù ì á ò à è è í á í á ò ì à y ò ñ y á s - è d -
 ì í è í ñ à ò, à p - y è à è ò ð ì í ù à ò ì ì í á ò à è à ð ì á à í á ð à ò ì à y ò á d - ì í è í ñ ò. Í á í à è í,
 í á ñ ñ ò ð y í á ò ì ð ì à è ú í í á í á ç à à í è à d - ì í è í ñ ù, á í è ù ò à y - à ñ ò ù y è à è ò ð ì í í á
 á í á è í á ò ì à y ò ñ y á ð - ñ ñ ò ì y í è y ò, ò à è è à è ñ ò à à è è - á í è à ì ç í à - á í è è
 è à à ç è è ì í ò è ù ñ à (d₀ - è d₁ - à à ò à è ñ ò ð à ì y ò ñ y ç à í y ò ù í è ç è í y í á ð à à ò è - à ñ è ò ð
 - à ñ ò ù d - ì í è í ñ ù à ò ì ì í á ò à è à ð ì á à.

À è y á í è ù ò è í ñ ò à à è à ð à è à í á ò à ð à è ò à ð ì í ç à í í è í á í è à y è à è ò ð ì í à ì è d -
 ì í è í ñ ù à ò ì ì í á ì á ò à è è à ç à ñ - à ò ì á ð à ò ì á à à à è á í ò ù y è à è ò ð ì í í á ì ò
 à ò ì ì í á ò à è à ð ì á à. Ò à è è ì í á ð à ç ì ì í ñ è à à í è à y à è y ð ò ñ y á í í í ð à ì è, à d -
 ì í è í ñ à à ò ì ì í á ì á ò à è è à í á è à à à à ò à è ò à ò ò à í ò ð ì ò ì è ñ à í è ñ ò à à ì è.
 È ñ è è ð - á í è à ì y à è y ð ò ñ y à ò ì ì ù ò è ò à í á è à à í à à è y, è í ò ð ù á á í ò è è - è à í ò
 à ñ à ò à ð ò à è ò d - ì á ò à è è í á è í à è ò è ð ò ð ò á í è ù ò ò ð - à ñ ò ù s - è d - à à è á í ò ù
 y è à è ò ð ì í í á á d - ì í è í ñ ò à ò ì ì í á ò à è à ð ì á à. Í ð ì ñ ñ à ð ð è à à à ò ñ y ò à è à à
 í í ð à à à è à í á y ç à è í í ì á ð ì í ñ ò ù á è ç ì á í á í è è à è ò à í ò ð ì ò ð ì ù ò ñ à í è ñ ò à è à
 ç à à è ñ è ì ñ è ò ì à ò ì ì í á í í ñ ñ à ð à è à à à à à à à à è à à à à ì ð y à ò í á ð è í à è - à ñ è í é
 ñ è ñ ò à ì ù. Ò à è, í á í ð è ì á ð, à ñ è è à ò ì ì ù ò è ò à í á è à à í à à è y y à è y ð ò ñ y
 á í í í ð à ì è y è à è ò ð ì í í á, ò ì ñ è à à ò ð ù è à ç à í è ì è ò è ð è í í è è è í è í à è è ò à à
 ç à ò à à ò ù à à ð ò è ç d - ì í è í ñ ù à ò ì ì í á ò à è à ð ì á à 0,54 è 1,72 y è à è ò ð ì í á
 ñ ñ ò à à ò ñ ò à à í í. Á ù á á í è ù ò è í è à è ò à í ò ð ì ò ì è ñ à í è ñ ò à à ì è í á è à à à ð ò
 à à ò í è è è ò à í ò à è. Ò à è à y à à ç à è í í ì á ð ì í ñ ò ù í á à è ð à à à ò ñ y è à è y ì á ò à è è í á
 à ð ò à è ò à ð ò ì í, í á ð à ò ì á à à è á í ò ù y è à è ò ð ì í í á ì ò à ò ì ì í á ì á ò à è è à è
 à ò ì ì à ì ò à è à ð ì á à ñ è à à ò à ò ð à ñ ñ ñ à ð ð è à à à ò ù è à è ò à à è è - á í è à y è à è ò ð ì í í é
 í è í ò ì í ñ è ò à í è ð à ñ ò ì í ñ y ò è à à í à ò ì ì í á ì á ò à è è à, è è á í à ò ì ì í á ò à è à ð ì á à
 è à ð à è à à. Í á ù à y ò è ð è í á spd - ì í è í ñ ò è à ð à è à í á ò ì á í ù ò à à ò ñ y ñ
 ò à à è è - á í è à ì à ò ì ì í á í í ñ ñ à ð à è à à ì ð y à ò, ñ ñ ò à à ò ñ ò à à í í
 ò à à è è - è à à à ò ñ y í è í ò ì í ñ ò ù ñ ñ ò ì y í è è - n(Á)/yÁ - á í è ð à ñ ò ì í ñ y ò à ò ì ì í á
 ì á ò à è è à è ò ì á í ù ò à à ò ñ y à à è è ç è à ò ì ì í á ò à è à ð ì á à. Í í á í è í ò ì í ñ ò ù ð
 ñ ñ ò ì y í è è (Á)/yÁ í í í è ì à à ò ñ y - è ñ è í y è à è ò ð ì í í á, í ð è ò ì à y ù è ò ñ y í á í à è í
 y è à è ò ð ì í - á í è ù ò ò è ð è í ù à à è á í ò ì é ì í è í ñ ù, à ò è ð è í á ì ñ è à à í á è
 í ò ñ - è ò à í á ì ò á í á í í è í ñ ù á í ò ð ì á í y Ó à ð ì è ì í à à ò ñ è ò è ò ù ì á ð ì é
 y í á ð à è è Ó à ð ì è è à ð à è à í á.

Ñ è à à ò à ò ì à è à à ò ù, - ò ì y í á ð à è y ñ à y ç è ì á - ì á è ñ - ñ, è ì á - ñ á è à ð à è à à ò
 ò à è à à í í ð à à è y à ò ñ y í è í ò ì í ñ ò ù ñ ñ ò ì y í è è, ð à ñ ñ - è ò à í ù ò ì ò à à è ú í í à è y

àòì ì á ì àòàèèà è àòì ì á óàèáðí àà. Èàè ì ðààèèí, ì èí òí ì ñòù ñí ñòí ýí èé àèý àòì ì á ì àòàèèà á ðýáò ì í á Ùòààòñý ñ óààèè-áí èàì àòì ì í á ì í ì á ðà. Ñí ì òààòñòàáí í í è ýí áðàèý ñàýçè ì áæáó ì àòàèèè-áñèèì è àòì ì àì è á èàðàèàò àí èæí à ðàñòè. Àèý sp-ýèàì áí òí á óàèáðí àà, èðàì í èý è í èí àà óñòàì í àèáí à í áðàòí àý çààèñèì ì ñòù, ò.á. óààèè-áí èà ì èí òí ì ñòè ñí ñòí ýí èé ñí ì ðí áí æàààòñý òí áí ùòáí èàì ýí áðàèè ì áæàòì ì í í é ñàýçè. Í áúýñí ýàòñý ýòí òàì, òí ó d-ì àòàèèí á í àèáí èùòàý ì èí òí ì ñòù ñí ñòí ýí èé ì ðèòí àèòñý í á áàðòí èé èðàé ì í èí ñù, à ó sp-ýèàì áí òí á, à òí ì ò-èñèà è àèý óàèáðí àà, í àèáí èùòàý ì èí òí ì ñòù s è d(p) ñí ñòí ýí èé í áòí àèòñý ì á áí á ýí áðààòè-áñèí é çí í Ù. Í í ýòí ò ó èàðàèáí á IV è V áðòí ì í í ì áðà óààèè-áí èý àòì ì í á ì í ì áðà ñèàáóáò í æèààòù óààèè-áí èà ýí áðàèè ñàýçè èàè ì áæáó àòì ì àì è ì àòàèèà, òàè è ì áæáó àòì ì àì è óàèáðí àà è òí áí ùòáí èà ýí áðàèè ñàýçè ì áæáó ðàçí í ðí áí Ùì è àòì ì àì è.

Ýí áðàèý àòì ì èçàòèè èàðàèáí á í ì ðàààèýàòñý ì í óðàáí áí èp:

$$\Omega = \Delta H^{\circ}_{\text{MeC}(298)} - \Delta H^{\circ}_{\text{Me}(298)} - \Delta H^{\circ}_{\text{N}(298)}$$

ààà $\Delta H^{\circ}_{\text{MeC}(298)}$ — òàì èí òà í áðàçí àáí èý èàðàèáí á èç ýèàì áí òí á; $\Delta H^{\circ}_{\text{Me}(298)}$ — òàì èí òà ñóàèèì àòèè ì àòàèèà; $\Delta H^{\circ}_{\text{N}(298)}$ — òàì èí òà ñóàèèì àòèè àðàòèòà.

Ýí áðàèý ñàýçè ì á-ì á — èàè ñí ñòàáí óp ò-àñòù ýí áðàèè àòì ì èçàòèè ì í æí ì í ì ðàààèèòù ì í ì èí òí ì ñòè ñí ñòí ýí èé, ì ðèòí àýùáèñý á èàðàèààò í à s è d-ì ì èí ñù ì àòàèèà. Í ðè ýòí ì ì ðàáí í èàààòñý ì ðýì àý çààèñèì ì ñòù ààèè-èí Ù ýí áðàèè ñàýçè ì á-ì á ì ò ì èí òí ì ñòè ñí ñòí ýí èé. Í àì ðèì áð, ýí áðàèý ì áæàòì ì í í é ñàýçè á ì àòàèèè-áñèí ì òèòàì á ðàáí à 112 èèàè/á-àòì ì, à ðàññ-èòàì í àý ì èí òí ì ñòù ñí ñòí ýí èé àèý í ááí ñí ñòààèýáò 0,46 ýè/ýÁ. Á ì í í í èàðàèèàà òèòàì à ì èí òí ì ñòù ñí ñòí ýí èé, ì ðèòí àýùáèñý ì á àòì ì òèòàì à, ñí ñòààèýáò 0,24 ýè/ýÁ è, ñí ì òààòñòàáí í í, ýí áðàèý ñàýçè Ti-Ti á èàðàèèàà áóáàò ðàáí à 59 èèàè/á-àòì ì. Í í áí áí Ùì ì óòàì ðàññ-èòàì à ýí áðàèý ñàýçè Ñ-Ñ, í áí àèí á ì í ñèàáí áì ñèó-àá ì ðèí èì àèàñù í áðàòí àý çààèñèì ì ñòù ýí áðàèè ñàýçè ì ò ì èí òí ì ñòè ñí ñòí ýí èé, ì ðèòí àýùáèñý á èàðàèèàá í à sd(p)-ì í èí ñó óàèáðí àà. Ñí ì òààòñòàáí í í ýí áðàèý çàýçè ì á-Ñ ì ðààòñòààèýáò ñí áí é ðàçí èòó ì áæáó ýí áðàèèè àòì ì èçàòèè è ñòí ì í é ýí áðàèè ñàýçè ì á-ì á è Ñ-Ñ.

À òààè. 3-4 ì ðèààááí á ðàññ-èòàì í Ùá ì í í àñòí ýùáé ì àòí àèèà ààèè-èí Ù ýí áðàèè ñàýçè ì á-ì á, Ñ-Ñ è ì á-Ñ, Fá-Y, Y-Y, Fá-Fá, óáí àèàòàì ðèòàèèí ì ñí àèàñòpùèàñý ñ èçààñòí Ùì è ýèñí áðèì áí òàèèí Ùì è àáí í Ùì è ì ñáí éñòàáì èàðàèáí á è ñí ààèí áí èè æàèáçà ñ sp-ýèàì áí òàì è. Àèáí ì, òí èàðàèèà Ñí₂Ñ, Ñí₃Ñ è Ñí₃Ñ èì áàò ì ðèòèòàòàèèí Ùá çí à-áí èý ýí áðàèè ñàýçè ì á-Ñ. Ýòí ñàèààòàèèñòàáò ì í ááí çí ì æí ì ñòè ì áðàçí àáí èý èàðàèèàá èí áàèèòà è ì èèàèý á ñòàì áàðòí Ùò óñèí àèýò. Í àñòààèèí Ùì ñí ààèí áí èàì ýàèýpòñý è èàðàèèà æàèáçà, ó èí òí ðí áí ýí áðàèý ñàýçè Fá-Ñ òí òý è èì áàò ì í èí æèòàèèí í á çí à-áí èà, í áí àèí ì í ààèè-èí á í í à çí à-èòàèèí ì ì ðèè-ààòñý ì ò ýí áðàèè çàýçè ì á-Ñ, ðàññ-èòàì í í é àèý áðòàèèò èàðàèèàá. Ó-èòùáàý ñòàáí èòàèèí ì á Ùñí èèá çí à-áí èý ýí áðàèè ñàýçè ì á-Ñ àèý èàðàèèàá òèòàì à è àáí ààèý, ñèàáóáò ì ðàáí ì èí æèòòù ñòù àñòàì àáí èà ó í èò èí ààèáí òí í é ñàýçè ì áæáó ðàçí í ðí áí Ùì è àòì ì àì è, òí ì í áòàáðæàààòñý ýèñí áðèì áí òàèèí ì á Ùñí èèì è çí à-áí èý ì ýàèèòí ñí ì ðí òèàèáí èý è òàáðàì ñòè è ì í í èæáí í Ùì è çí à-áí èý ì è ì í áóèý ì í ðí àèèí í é òí ðòáí ñòè ì í ñòàáí áí èp ñ ýòèì è òàðàèèòàðèñòèèàì è àèý èàðàèèàá á ààòí èý, òèòàì à è áðòàèè ì àòàèèí á.

ðàçàèòùé ì í áòí á è ì í ñòðí áí èp èàçèàòì ì í é ì í ààèè àáù àñòàà (Èàáí Á) ì í çáí èýáò í á òí èüèí èí èè-àñòàáí í í ì óáí èòù ýí áðàèp

òèì è-áñéí áí áçàèì í äáéñòáèÿ ì äæáó àòí ì àì è á èàðáèáí Úò Òàçàð, í í è ðàññ-èòàòù òòáí áí ü èí í í ì òè (i), èí äàèáí òí í òè (q) è ì àòàèèè-í í òè (η), äää

$$i + q + \eta = 1$$

$$i = \frac{E_{c\grave{a}}(Me - C)}{\Omega}; q = \frac{E_{c\grave{a}}(C - C)}{\Omega}; \eta = \frac{E_{c\grave{a}}(Me - Me)}{\Omega}.$$

Òàáèèòà 3

Ýí äðáèÿ ñäÿçè (E_{ñá}) Me-Me, C-C, Me-C
á èàðáèáò d-í äðáòí áí Úò ì àòàèí á

Èàðáè á	Á _{ñá} Me-Me, èèáè/í í èü	Á _{ñá} Ñ-Ñ, èèáè/í í èü	Ω èàðáèá à; èèáè/í í èü	Á _{ñá} Me-Ñ, èèáè/í í èü	η ì á-l á
TiC	59	75	328	194	0,18
ZrC	178	122	364	64	0,49
HfC	207	180	400	13	0,52
VC	91	85	336	160	0,27
NbC	171	145	394	78	0,43
TaC	154	200	395	39	0,39
V ₂ C	62	77	340	201	0,18
Nb ₂ C	224	115	363	24	0,62
Ta ₂ C	195	190	400	15	0,49
MoC	175	150	380	56	0,46
WC	112	200	382	70	0,29
Cr ₇ C ₃	99	170	283	14	0,35
Mo ₂ C	234	145	427	48	0,55
W ₂ C	136	180	381	65	0,36
Mn ₃ C	64	150	233	19	0,28
Fe ₃ C	101	160	263,7	2,7	0,38
RuC	137	145	325	43	0,42
OsC	78	210	350	69	0,22
Co ₂ C	136	180	267	-49	0,51
Co ₃ C	138	180	262	-56	0,53
Ni ₃ C	173	170	263	-80	0,66

Òàáèèòà 4

Ýí äðáèÿ ñäÿçè (Á_{ñá}) Ý-Ý, Fe-Fe, Fe-Ý
á ñí äàèí áí èÿð æáèáçà ñ sp-ÿéâì áí òàì è

Ñí òòáá	Ω ýí äðáè ý àòí í èç àòèè; èèáè/í í èü	Ýí äðáèÿ ñäÿçè á èèáè/í í èü			η Ý-Ý
		Fe-Fe	Ý-Ý	Fe-Ý	
FeAl	180	83	38	59	0,21
Fe ₃ C	263,7	101	160	2,7	0,61
Fe ₃ Si	215	105	76	44	0,35
FeSi	227	91	75	61	0,33
FeSi ₂	227	100	76	51	0,34
Fe ₃ Sn	182	107	38	37	0,21
FeSn	192	127	45	20	0,23
Fe ₄ N	216	88	110	18	0,51
Fe ₃ P	218,2	105	51	63	0,23

Enneáái áái eá i ðeðí áú òeì e-áñeí áí açaeì í ááeñoàeý ðáí ðááí í yì eññeí í í úì è ì áòí áàì è á ñí eááàò è ñí í í ñòàáeáí eá yòèò ðáçóeúòàòí á ñ ðáñ-áòàì è, í ðí eçáí àeì úì è í í eáðòàì ðáñí ðáááeáí eý yí áðae è áaeáí òí úò yéaeòðí í í á á í ðeaeèeæáí èè Éaaí á, í í çáí eèeí á í áòòðí í í yéñí áðeì áí ðá óáááeòúñý á í áí áòí àeì í ñòè è áí ñòàòí ÷ í í ñòè ì í ááeèðóàì úò í ðááñòàáeáí eé eí í ááí ñeðí ááí í í é ñðááú á í ðeaeèeæáí èè eáàçeàòí í í áí ñòðí áí eý eáðáeáí á è ñí eááí á [6, 7].

Í í eó-áí í úá ðáçóeúòàòú í í çáí eýeè í áááyouñý í à í eí áí ðáí ðí í ñòú eñí í eúçí ááí eý ááí í í é ì í ááeè í ðe í í eñáí eè í áeðí ñeí í e-áñeèò Óeçeéí -òeì e-áñeèò ñáí eñoá, í áí ðeì áð, ñí eááí á ì áòaeéí á è í í eó-áí eá á eí í í úòðáðí í í yéñí áðeì áí ðá ðáçòáðúeò í ðááeè, í í çáí eýðúeò í ðááñeàçúáàòú eñeí í í á ñáí eñoáí Ñ_{oáñ-} eáe óóí eòeð ñòðí áí eý yéaeòðí í í úò í í eí ñí í í áðáðáòeè ì áòaeèà.

Í ðááñòàáeáí eá òeì e-áñeí é ñðááú, á eí òí ðí é açaeì í ááeñoàeá ì áæáò yéaeòðí í áí è áaeáí òí í é í í eí ñú ðáññí áððeáááòñý eáe açaeì í ááeñoàeá eí eéáeðeáeçeðí ááí í úò, eí eáeèeçí ááí í úò è í í eýðí í í úò ñí ñòí yí eé yéaeòðí í í á, í í çáí eèeí í ðááñòàáeòú yéáí áí òú á áeáá óí ðí úáí í úò çí í í úò ñòðóeòòð (eáðò ðáñí ðáááeáí eý), á eáðòú ðáñí ðáááeáí eý yéaeòðí í í úò í í eí ñ (ðeñ.1) í ðááñòàáeýðò ñí áí é çááeñeì í ñòè yí áðae è Á áaeáí òí úò yéaeòðí í í á í ð ááeè-èí ú eáàçeèè í óeúñà Á(k) í ðe çí à-áí eýò áeááí í áí (n = 1,2,3...), í ðáeèòáeúí í áí (l = 0,1,2..., n - 1) è ì ááí eòí í áí m = 0,1,2,3) eááí òí áúò ÷eñáe (ðeñ.1). Áeááí áàðý m-ðáñúáí eáí eð p-í í eí ñá ðáçááeýáòñý í à p₀, p₁, p₋₁; d-í í eí ñá í à d₀, d₁, d₂, d₋₁, d₋₂-í í áí í eí ñú. Á ñeèò ñeì ì áòðeè ðáññí áððeááðòñý òí eúeí í í eí æeðáeúí úá çí à-áí eý l.

Éðeáúá Á(k) (ðeñ.1) ðáññ-èòáí ú áí eí òú áí çí à-áí eý

$$k_{\max} = 4 \left(\frac{3}{4} \right)^{2/3} = 2,418 \quad (6)$$

á eí ðáðáàeá çí à-áí eé yí áðáeè í ð E_{min} = 1,0 à.á. Á_{max} = 20 à.á. (1 à.á. = 27,23 yÁ)

Í í eó-áí í úá çááeñeì í ñòè yí áðae è áaeáí òí úò yéaeòðí í í á í ð ááeè-èí ú eáàçeèè í óeúñà Á(k) [3-5] ðáñeéááúááeè á ðýá í í í í eéí í í áí ×ááúøááà è í áðáí e-èááeèeñú eáááðáòe-í úì ÷eáí í í . Áeý yòí áí yí áðáeý í ñí í áí í áí ñí ñòí yí eý yéaeòðí í í á áeý ááeúí áeøeò ðáñ-áòí á í à YÁÍ çááááeáñú ðýáí ì

$$E(k) = b_1 P_0(k) + b_2 P_1(k) + b_3 P_2(k) \quad (7)$$

ááá P₀(k), P₁(k), P₂(k) — í í eéí í í ×ááúøááà, í ððáæáðúeá eí áàðeáí òí í á, eéí áeí í á è eáááðáòe-í í á eçí áí áí eá s, p₀, p₁, d₀, d₁, d₂ — áaeáí òí úò í í eí ñ yéáí áí ðà;

$$P_0(k) = 1$$

$$P_1(k) = (k - 7) \quad (8)$$

$$P_2(k) = (k^2 - 14k + 35)$$

b₁, b₂, b₃ — eí yóòeòeáí òú í ðe ñí í ðááòñòáóðúeò í í eéí í í áð ×ááúøááà.

×èñéáí í Úà çí à=áí èý èí ýòòèòèáí òí à ×ááÚøááà è ýí áðàèè Õáðì è éáàèðòðÙèò ýèàì áí òí à 2-5

Yèàì á í ò	Õðí áá í ú Õáðì è E _F , y \bar{A}	Çí à=áí èý èí ýòòèòèáí òí à ×ááÚøááà			Õðí ááí ú áàéáí òí í ñ òè
		b ₁	b ₂	b ₃	í í èí ñ
Ñ	4,35	-0,343	0,065	-0,016	s
		0,140	-0,029	0,008	p ₀
		0,254	-0,047	0,011	p ₁
Mn	- 10,60	-0,311	0,058	-0,014	s
		-0,044	0,010	-0,003	d ₀
		-0,031	0,008	-0,003	d ₁
		-0,082	0,016	-0,004	d ₂
Si	1,63	-0,293	0,054	-0,013	s
		0,000	-0,002	0,001	p ₀
		0,086	-0,015	0,003	p ₁
P	-6,80	-0,629	0,114	-0,026	s
		-0,323	0,055	-0,011	p ₀
		-0,234	0,041	-0,009	p ₁
S	-1,10	-0,395	0,071	-0,016	s
		-0,079	0,011	-0,001	p ₀
Cr	0,68	-0,249	0,047	-0,011	s
		0,036	-0,001	-0,001	d ₀
		0,031	-0,001	-0,001	d ₁
		-0,048	-0,011	-0,004	d ₂

Òàèèì í áðàçí ì , éàæääý èðèàäý èçì áí áí èý ýí áðàèè áàèáí òí í é í í èí ñÚ ì ò áàèè=éí Ú èáàçèè ì óéúñà ì ðáññòáàèýèáñú òðàì ý èí ýòòèòèáí òàì è Õ₁, Õ₂, Õ₃, í òí áðàæáðÙèì è èí áàðèáí òí í á, èèí áéí í á è éáááðàðè=í í á áà èçì áí áí èá.

Ðàñí ðáááèáí èá áàèáí òí Úò ýèáèððí í í á ì áðáðí áí Úò ì áðàèèí á, èì áðÙèò s, d₀, d₁, d₂-áàèáí òí Úá í í èí ñÚ, ì ðáññòáàèýèí ñú áááí áàòàòùð èí ýòòèòèáí òàì è ×ááÚøááà Õ₁-Õ₁₂ ñí ì òááòñòáòðÙèì è =áòÚðàì òðèááàì èí ýòòèòèáí òí à b₁, b₂, b₃.

Áèý í í èñáí èý í í èí ñí í é ñòðóèòòÚ ð-ýèáì áí òí á, èì áðÙèò s, p₀, p₁-áàèáí òí Úá í í èí ñÚ, òðááí áàèí ñú áááýòù èí ýòòèòèáí òí á (Õ₁₀, Õ₁₁ è Õ₁₂ — èí ýòòèòèáí òÚ ì ðèí èì àèèñú ðááí Úì è í óèð).

Èí ýòòèòèáí òÚ ðáññ=èòÚáàèèñú èñòí áý èç çí à=áí èé óóí èòèé Á(k), áçýòÚò á 13 ðàçèè=í Úò òí =èáò á èí òáðáàèá èçì áí áí èý èáàçèè ì óéúñà 0 < k < k_{max}.

Áñá ðáñ=áòÚ ì ðí èçáí àèèèñú í à ÝÁÌ .

Èñí í èùçí ááí èá èí ýòòèòèáí òí à ×ááÚøááà í í çáí èýáò í í óðááí áí èð (7) áÚ=èñèèòù ýí áðàèð áàèáí òí í é í í èí ñÚ ýèáèððí í í á áèý ñí ì òááòñòáòðÙèò ýèáì áí òí á, ì ðèì áí áí èá ì áòí áà èí ì ì ùðòáðí í áí ì í áàèèðí ááí èý, ñ èñí í èùçí ááí èáì èí ýòòèòèáí òí à ×ááÚøááà è çí à=áí èý ýí áðàèè Õáðì è (òááé. 5), áááò áí çì í áéí í ñòù óñòáí í áèòù ñáýçù ì áæáò òèçèéí -òèì è=áñèèì è ñáí èñòáàì è ñí èááí á è ýèáèððí í í Úì ñòðí áí èáì éáàèðòðÙèò ýèáì áí òí á á òí ðì á èèí áéí Úò (9) èèè àèñèðèì èí áí òí Úò çáàèñèì í ñòáé í í èéáññáì Á, Á, Á, Á, í í çáí èýðÙèò èí èè=áñòááí í í áÚ=èñèýòù ñáí èñòáà (Ñ): òàì ì áðáòòðó

í ðááðàùáí èý yéài áí òà à ñí èàáà ì áòàñèñòáí í à÷àèúí Ùò ó÷àñòèí á, í ðáááèúí óþ ðàñòáí ðèì í ñòù yéài áí òà (àò. %) á ðááðáí é (α), æèáèí é (β) Òàçà.

$$\bar{N}_{\text{óáí ò}} = \sum \alpha_i X_i + B \quad (9)$$

$\bar{N}_{\text{óáí ò}}$ — ðáí ðáòè÷àñèè ðàññ÷èòùááái í á ñáí éñòáí; \bar{O}_i — èí ýòòèèèáí òù $\times \text{ááùøááà}$ èáàèðòþùáái èí ì í í í áí òà ñí èàáà; \bar{A} — í í ñòí ýí í Ùé ÷èáí.

Í ðí áí èæ áí èà ò ááè. 5

Yéai á í ò	Óðí áá í ù Óáòí è ; $E_F, \gamma \bar{A}$	Çí à÷áí èý èí ýòòèèèáí òí á $\times \text{ááùøááà}$			Óðí ááí ù ááèáí òí í ñ òè í í èí ñ
		b_1	b_2	b_3	
V	2,04	-0,134	0,025	-0,006	s
		0,103	-0,014	0,001	d_0
		0,109	-0,014	0,001	d_1
		0,028	-0,001	-0,001	d_2
Ti	2,58	-0,091	-0,018	-0,005	s
		0,129	-0,019	0,002	d_0
		0,165	-0,025	0,003	d_1
		0,091	-0,013	0,001	d_2
Nb	-0,54	0,162	0,030	-0,007	s
		0,043	-0,003	-0,001	d_0
		0,029	0,000	-0,001	d_1
		-0,063	0,014	-0,004	d_2
Mo	-0,68	-0,216	-0,040	-0,009	s
		0,008	0,003	-0,002	d_0
		-0,021	0,008	-0,003	d_1
		-0,116	0,023	-0,006	d_2
Ni	-9,25	-0,587	0,106	-0,024	s
		-0,346	0,065	-0,016	d_0
		-0,423	0,076	-0,017	d_1
		-0,456	0,082	-0,018	d_2
αFe	-2,47	-0,408	0,075	-0,018	s
		-0,018	0,024	-0,007	d_0
		-0,143	0,028	0,007	d_1
		-0,197	0,037	-0,009	d_2
γFe	-2,45	-0,404	0,074	-0,018	s
		-0,119	0,024	-0,007	d_0
		-0,140	0,027	0,007	d_1
		-0,192	0,036	-0,009	d_2
βFe	-2,45	-0,399	0,072	-0,017	s
		-0,121	0,024	-0,006	d_0
		-0,127	0,026	-0,006	d_1
		-0,186	0,035	-0,007	d_2

\bar{A} ðááè. 6 í ðèáááái Ù ðáçòèùðàòù èí ì í ùþòáðí í áí ì í ááèèðí ááí í áý (\bar{N}) ñí èááí á í à í ñí í áá æáèáçà: α, β, T_n èàè òóí èòèè í áí áóí àèì í áí è áí ñòàðì ÷í í áí ÷èñèà èí ýòòèèèáí òí á $\times \text{ááùøááà}$ X_i . Í ðè ýòí èàè í í èàçùáááð áí àèèç á Ùñí èèà çí à÷áí èý èí ýòòèèèáí òí á èí ððáèýòèè ñàèáðáèùñòáðò í òóí èòèí í áèúí í é çààèñèì í ñòè ì áæáó èñèí Ùí ñáí éñòáí è yéáèððí í í Ùí ñòðí áí èáì èáàèðòþùèò èáàçèáòí í á èí ì í í í áí òí á á í ðáááèáò èèàññà èáàèðòþùèò yéài áí òí á: \bar{A} — òáððèðèçàðì ðí á; \bar{A} — áóñòáí èçàòì ðí á; \bar{A} — í áðèèðèçàðì ðí á, \bar{A} -èèáññ yéài áí òí á, í á áí øááøèè á $\bar{A}, \bar{A}, \bar{A}$ -èèáññù.

Óéàçáí í Ùá ì áòí á Ù ðàñ÷àðà ñáí éñòá ñí èááí á ðóáí í èáàèèò ñí ááèí áí èè èàè òóí èòèè èò yéáèððí í í í áí ñòðí áí èý ááþò áí çì í áí í ñòù í áááæí í áí ðàñ÷àðà ñòáí áí è èí í í í ñòè, èí ááèáí òí í ñòè è ì áðáèèè÷í í ñòè, ð.á. òèì è÷áñèí é ñáýçè èàè òóí èòèè ì áæáðì í í áí áçàèì í ááèñòáèý. Í í ýòí ó

òàèàÿ ààèè÷èí à ì íæàò ñèóæèòù íñí íáí é ðàñ÷àò à áí óòðáí í ááí òðáí èÿ(äÿçèí ñòè)ñí ààèí áí èè á òàáðáí ì (èí í ááí ñèðí ááí í í ñí ñòí ÿí èè). Í íÿòí ó í ðàáñòààèÿèí ñù áñòáñòááí í Õì í æèáàòù ñòùáñòáí ááí èÿ í ðí ñòí é óóí èòèí -í àèüí í é çààèñèí í ñòè ì áæáó ààèè÷èí í é èí ÿóòèòèèáí òà òðáí èÿ èññèááóáí Õò ì àòáðèàèí á òèí à:áðàòèò,÷òáóí,ñòàèü,àèñòèüòèä ì í èèáááí à,í èòðèä áí ðà è ò.í. í áí àòàèèè÷áñèè è ñí ààèí áí èÿí è è ñòáí áí ùð èí í í í ñòè í áí àòàèèè÷áñèè ì àòáðèàèí á áí í áù.á. ðè ÿòí ñèááóáó í òí àòèòù,÷òí í ñòùáñòáí ááí èè òàèí áí òèí à çààèñèí í ñòè áí ñèò í í ð áù.á í á ñí í áù.áèí ñù.

Áèèÿí èà ÿèàèòí í í í áí ñòðí áí èÿ èáàçèàòí ì í á í à ðàñòáí ðèí í ñòù ÿèáí áí òí á á æèèàçá

Éèáñ ÿèáí á í -òí á í í [2]	Óðááí áí èà ñáÿçè	Èí ÿóòè-òèáí ò èí ððàèÿòèè ì í áàèè
A	$\hat{O}_i = (1258,9 + 813,3 \hat{O}_4 - 33979,3 \hat{O}_9 - 27809,1 \hat{O}_{12} + 57,0 \hat{O}_9)$ $\alpha = (79,53 + 1684,98 \hat{O}_3 - 148,11 \hat{O}_4 + 2518,77 \hat{O}_8 + 548,02 \hat{O}_{10})$ $\beta = (43,14 - 1122,74 \hat{O}_{11} - 5,875 \hat{O}_{13})$	<p>0,99</p> <p>0,98</p> <p>0,97</p>
Á	$\hat{O}_i = (1458,1 + 22034,46 \hat{O}_9 - 24330,39 \hat{O}_{12} + 27809 \hat{O}_{12} + 1,517 \hat{O}_{13})$ $\alpha = (20,75 + 194,02 \hat{O}_{12} + 0,981 \hat{O}_{13})$ $\beta = (25,06 + 358,14 \hat{O}_{12} + 0,982 \hat{O}_{13})$	<p>0,99</p> <p>0,87</p> <p>0,87</p>
Á	$\hat{O}_i = (1362,9 + 83989,8 \hat{O}_6 - 81468,9 \hat{O}_9)$ $\alpha = (17,64 + 1740,93 \hat{O}_3 - 7500,69 \hat{O}_6 + 7724,24 \hat{O}_9 - 2,877 \hat{O}_{13})$ $\beta = (9,90 - 7756,56 \hat{O}_6 + 9608,57 \hat{O}_9 - 84,69 \hat{O}_{10})$	<p>0,68</p> <p>0,94</p> <p>0,85</p>
Á	$\hat{O}_i = (1291,2 + 1494,59 \hat{O}_4 - 36532,59 \hat{O}_{12})$ $\alpha = (-2,05 - 3571,50 \hat{O}_6 - 652,56 \hat{O}_8)$ $\beta = (14,48 + 57,35 \hat{O}_{10} - 2,79 \hat{O}_{13})$	<p>0,92</p> <p>0,97</p> <p>0,99</p>

Áèááá III. Ðàñ÷àò ðáóáí òóðù í í èðùòèè òí ðí í çí Õò óçèí á èí èáñà ì ðèí áí èòàèüí í é òðáí ñí í ðòí Õì ñðááñòááí .

Áááááí èá.Ðáçóèùòàòí è í ðàáùáóùèò àèáá áùèí í í èáçáí í,÷òí ÿí áðàèÿ òèí è÷áñèí é ñáÿçè è,í ðáæáá áñááí,ÿí áðàèÿ àòí ì èçàòèè è ì áæáòí í Õò ñáÿçáè ÿàèÿàðñÿ ì áðí é í óáí èè ñòáí áí è èí í í í ñòè,èí áàèáí òí í ñòè è ì àòàèèè÷í ñòè òèí è÷áñèí áí áçàèí í áàèñòàèÿ ì áæáó àòí ì áí è èí í ááñèðí ááí í í áí ááùáñòáá.Èí í á÷í í,ñòùáñòáóðò è áðòàèá ì áòí áù í óáí èè ÿóòàèòèèáí í áí çàðÿáá ì áæáó àòí ì áí è èáè á ì í èáèóèàò,òàè è á èðèñòàèèèáò,èí òí ðùá ì ðèááááí Õ,í áí ðèí áð,á ì í í áí í áðàçí Õò òðóááò í ðí ó.Ñ.Ñ.Áàóáí í áá.Òàèèá í óáí èè ì í áóò áùòù èñí í èüçí ááí Õ àèÿ óñòáí í áèáí èÿ èí ððàèÿòèè ñ èí ÿóòèòèèáí òí ì òðáí èÿ ááùáñòá, í í ñèí èüèó áàèè÷èí à áí óòðáí í ááí òáðí èÿ ì áæáó àòí ì áí è ááùáñòáá èáè èçááñòí í èç èóðñà òèçèèè áñòù ááí ñæèí ááí í ñòù!Á òààè.7 ì ðèáí áÿòñÿ ááí í Õ,í í çáí èÿðùèá ñòááí èòù áàèè÷èí Õ ñòáí áí è èí í í í ñòè ñáÿçè á èðèñòàèèèáò ááùáñòá ñ áàèè÷èí áí è èò èí ÿóòèòèèáí òí á òðáí èÿ.È òàèí á

ñòàáí áí èà ì í çáí èýàò ñààèàòù àúáí à í óóí èòèí í àèüí í é çààèñèì í ñò è ì áæáó ýòèì è áàèè÷èí àì è.

Òàáèèòà7

Ñí ñò àà ò í ðì í çí í é èí èí áèè	Èí ýòòèòèáí ò ò ðáí èý,β ì í []	Ñò áí áí ù èí í í í ñò è, i	Í ðèì á÷áí èà Ì áò í à í í ðàáàè. áàèè÷èí Ù í
MoS ₂	0.06	0.06	Í í Ñ.Ñ.Áàòáí í áó
Áðàóèò	0.10	0.10	Í í Ñ.Ñ.Áàòáí í áó
AgJ	0.19	0.22	Í í Ñ.Ñ.Áàòáí í áó
PbO	0.23	0.15	Í í Ñ.Ñ.Áàòáí í áó
SiC	0.23	0.24	Í í Ñ.Á.Èóò í èèí à
AlN	-	0.43	Í í Ñ.Á.Èóò í èèí ó
Mo ₂ C	0.40	0.44	Í í Ñ.Á.Èóò í èèí ó
BN	0.42	0.38	Í í Ñ.Á.Èóò í èèí ó
Fe ₃ C	0.45	0.50	Í í Ñ.Á.Èóò í èèí ó
Si ₃ N ₄	0.65	0.72	Í í Ñ.Á.Èóò í èèí ó

Í í èó÷áí í Ùá à òàáè.7 ðáçóèùðàòù ì í çáí èýòò ñ áí èüøí é ñðáí áí ùò í áàááí í ñòè ðàññì àððèààòù áàèè÷èí ó èí ýòòèòèáí òà ððáí èý èàè áàèè÷èí ó èèí áéí í çààèñýùóòò ì ò ñòáí áí è èí í í í ñòè èðèñòàèèà ì àðáðèàèà,ðáèí ì áí áóáí í áí á èà÷áñòàá èí èí áèè(áèñèà) òí ð-ì í áéí èý è ì ðè òí ì òàè,÷òí ñ ì èí èì àèüí í é í ðèáéí é ì í áéí í í ðèí ýòù àèý ðàñ÷áòí á ñí í òí í øáí èà áèàà:

$$\beta = A \cdot i,$$

áàá í-ñòáí áí ù èí í í í ñòè ñí áàèí áí èý, A= 1!

Í í èó÷áí í Ùé áàáéí Ùé ðáçóèùðàòù ì í çáí èýàò áí ñí í èüçí áàòùñý èçááñóí í é òí ð-ì óéí é,òñòáí áàèèààòùáé ñáýçù ì áæáó èí ýòòèòèáí òí ì ððáí èý èà÷áí èý μ è áàèè÷èí í é èí ýòòèòèáí òà ððáí èý β, èí òí ðÙé òí áèáñòàáí í í çàì áí ýàòñý áàèè÷èí í é ñòáí áí è èí í í í ñòè ì ì àðáðèàèà,èñí í èüçóáì í áí á èà÷áñòàá èí èí áèè(áèñèà)óçèà òí ðì í áéí èý èí èáñà ððáí ñí í ðòí í áí ñðááñòàà:

$$\mu = i \cdot (1 + 0.0112 \cdot v) / (1 + 0.06 \cdot v),$$

áàá,í áí ðèì áð,áèý ÷óáóí à ñ β= 0.45(òáì áí ðèòí Ùé ÷óáóí ñ çáðí àì è ñí ñòááá Fe₃C) áèý í í áçàà,èì ðùááí ñéí ðí ñòù áàèèáí èý v.

Èí ýòòèòèáí ò ððáí èý ñéí èüáéí èý èçì áí ýàòñý èàè ì í èàçáí í á òàáèèòà:

Όαάεεöà 8

Ñêî ðî ñö ù v,èì /÷añ	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
Í î áãðîí .ò ðáí èÿ ñóðèá,μ	0.4 5	0.3 1	0.2 5	0.2 2	0.1 9	0.1 8	0.1 6	0.1 5	0.1 4	0.1 4
Í î áãðîí .ò ðáí èÿ ì î èð.μ	0.2 5	0.1 7	0.1 4	0.1 2	0.1 1	0.1 0	0.0 9	0.0 9	0.0 8	0.0 8
Ñðááí áá çí à÷áí èá,μ	.	0.2 0	0.1 6	0.1 4	0.1 3	0.1 2	0.1 1	0.1 0	0.1 0	0.0 9

Í ðè ì î ñòí ÿí í ùö áááèáí èÿö áí 20ì / ñáè ì ðè ñêî ðî ñöÿö ì î ðÿäèà 40ì / ñáè ááèè÷èí à ððáí èÿ ñêî èüæáí èÿ μ ì ñòááòñÿ ááèè÷èí í é ì î ñòí ÿí í í é ì ðè çáááí í ì ì èí ÿööèöèáí ðá ððáí èÿ β.0áèè ì áðáçí ì ,áí áèèç ðááè.7,8 ì î çáí èÿðò òðááðæáàðö,÷ðí í áí áðáèèè÷áñèèá ì áðáðèàèö ðèí à í èððèáá èðáí í èÿ ì î áòð ñáí áí áí ì ñí ì áðí è÷áðö ñí ñðáèúí ùì è è ÷óáóí í ùì è èí èí áèáí è òí ðí í çí á ì ì ì áðáí áððáí èí ÿööèöèáí òí á ððáí èÿ ì ðè áí ñòáðí ÷í ì á ùñí èèö çí à÷áí èÿö ì áðáí è÷áñèèö ì áðáí áððí á ÿòí áí ì áðáðèàèè.Á òááè.9 ì ðèáí áèòñÿ ñðááí áí èá ì áðáí è÷áñèèö ñáí èñðá ÷óáóí í á,ñðáèè45 è í áí áðáèèè÷áñèèö ì áðáðèàèí á ðáçèè÷í í áí ñí ñòááá ì î òáèè ì î èáçðáðèÿì èáè:

$$\begin{aligned} & \text{í ðáááè ì ðí ÷í ì ñòè } \sigma_A - e\bar{A} / \text{ì } \text{ì }^2, \\ & \text{òááðáí ñòü ì î } \bar{A} \text{ðèí áè} \rho \text{ } \bar{A} - e\bar{A} / \text{ì } \text{ì }^2, \\ & \text{óááðí áÿ áÿçèí ñòü à } \bar{A} - e\bar{A} / \text{ñí }^2 \end{aligned}$$

Όαάεεöà 9

Ñáí èñð á à	×óáóí ù	Ñò áèü 45	AlN	Mo ₂ C	Si ₃ N ₄	BN
σ _B	12-80	40-100	12-27	14-21	15-27	10-12
H _B	100-300	100-300	90	80	100	-
a _H	-	4-16	-	-	7.7-10.2	-

Í áí áðáèèè÷áñèèá ì áðáðèàèö è,á ÷áñòí í ñòè,í èðèá èðáí í èÿ ì áèáááðö ááñü ì á ùñí èèì è öèçèèí-ì áðáí è÷áñèè è ñáí èñðááì è,á ñáí ì èððèá èðáí í èÿ ì î áí áèí áèè ñí èððèáí ì áí ðá,èñí ì èüçóáí ùì á èá÷áñòáá ñí áçèè òðóöèòñÿ ááðáèáè ì î æáð ñèóæèðö ì á òí èüèí áèá÷áñòáá ðáèí áí é,í ì è ì î æáð á ùðö èñí ì èüçí ááí á èá÷áñòáá òí ðí í çí í áí áèñèá(òí ðí í çí í é èí èí áèè)èí èáñí í é ì áðö.

Áí èáá òí áí ,éáè ì î èáçöáááð ì áí áèèç í áó÷í ì-ðáóí è÷áñèèö ì ðí áðáí ì áááööèö öèðí , çáí èì áðöèòñÿ ðáçáðááí ðèáì è á í áèáñòè ì î èó÷áí èÿ èáðáí è÷áñèèö èçááèèé, ðááí-ðáðöèö á òñèí áèÿö óááðí ùö,çí áèí ì áðáí áí í ùö á òí ì ÷èñèá è ðáí èí á ùö ì ááðóçí é, èáðáí èèá ì èððèáá èðáí í èÿ ñí ñí áðèáèúí ì î ðèáí ðèðí ááí í í é òí í èí é ñòðóèöððí é ì î çáí èÿðò ì î èó÷áðö ì èçèí ðáí èí ì ðí áí áí ùè áÿçèè è áðáðèáè ñ ááñü ì á ùñí èèì è ì ñí í á-í ùì è ì áðáí è÷áñèè è ì î èáçðáðèÿì è :

$$\begin{aligned} & \text{áÿçèí ñòü ðáçðóðáí èÿ,ì } \bar{I} / \text{ì }^{3/2} > 25 = K_{1c}, \\ & \text{ì î áóèü } \bar{A} \text{éáóèèá } 15-22, \\ & \text{ì ðí ÷í ì ñòü ì ðè èçáèáá ì ðè } \bar{O} = 1400^\circ \text{E} > 600 \text{ì } \bar{I} \text{ \AA}, \end{aligned}$$

$$\text{oái éí í ðí áí áí í ñòù, } \bar{A}0 / \bar{i} \cdot \bar{E} > 3 + 4, \\ \text{oááðáí ñòù í í \bar{l} í í ñó > 7.$$

Í òñpáà ñí àñáé í ÷áàéáí í ñòùp ñéááóáò, ÷óí òáóí èèà í í áí áí í í éí éáí èý á í áéàñòè òí ðí í çí Ûò ñðáá áí éæí à á Ûòù ñáyçáí à ñ ðàñøèðáí èáí òóí àáí áí òàèuí Ûò è í ðèèèèáí Ûò í àó÷í í -èññéááí áàðáèüñéèð ðááí ò, í ðèáí òèðóð Û èòñý á ýòí é í áéàñòè í à í áí áðàèèè÷áñéèà ì àðáðèèè Û òèí à í èòðèèà èðáí í èý ñ í ðèáí òèðí ááí í í é ì èèðí èðèñòàèèè÷áñéí é ñòðóé-òóðí é.

Á ýòí ì í éáí á èí òááðèèðí ááí í Ûé í àéáò òèí à "Chem.Office" ì í æáò ñéóæèðù ñðááñòáí ì í ááèèðí ááí èý í ðèáí òèðí ááí í í é ì í éáéóèýðí í é ñòðóéòóð Û í èòðèèà èðáí í èý èàè í áðñí áèòèáí í áí ì àðáðèèèà ì í ñáí è í áðáí áððáí í ðèáí áí í áí àèý èñí í èúçí ááí èý á èà÷áñòáá àèñéí á è éí éí áí é òí ðí í æáí èý éí èáñ òðáí ñí í ðóí í áí ñðááñòáá.

Áèààà IV. Ñí çááí èá èí òááðèèðí ááí í í áí ì àéáòà Chem.Office àèý í ðí áéáí ì àðáðèèèí ááááí èý.

Áááááí èá. "Ñí áðáí áí í àý àèòèí èý"-èàè òí ðí à èí í ñòðóéðí ááí èý ì àðáðèèèí á ñ çáááí í Ûí è ñáí éñòááí è í á ýáèýáòñý í ðí ñòùí áí í áðáèáí èáí "í í èçó÷ááí ýí í èðèçí à", í í í í èðáyñù í à çáéí í Û Òèçè÷áñéí áí ì àðáðèèèí ááááí èý í í çáí èýáò ðàñøèðýòù í á òí èúéí áí çí í æí ñí òè ì àðáðèèèí ááááí èý, í í è ñòù áñòááí í Ûí í áðáçí ì àèèýòù í á í ðèòí é èáí èòàèà á ýòè í í á Ûá ñòáð Û òáóí í éí àè÷áñéí áí áèçí áñà(ñí ., í áí ðèí áð: Áèçí áóèè-ÑÑÑÑÐ¹ 1, 1992, ñ. 14-19- "Ñí áðáí áí í àý àèòèí èý").

Í ðáá Ûáó Û èé òðáòèé ýòáí ðááí ò Û í í çáí èèè í ðí èèèpñòðèðí ááòù í ðèí òèí èàèuí óp áí çí í æí í ñòù ðàñ÷áòà ðáòáí òóð Û ýÓÓáèòèáí í áí, èááéí áí, í ðí ÷í í áí ì àðáðèèèà èí éí áí é èèè àèñéí á òí ðí í æáí èý òðáí ñí í ðóí í áí ñðááñòáá ñ í í ì ì Û ùp í áí áðàèèè÷áñéèò ì àðáðèèèí á è, á ÷áñóí í ñòè, ì àðáðèèèà, èí áp Û ááí ñí ñòáá Si₃N₄.

Í èæá á ðáí èáò í ðááèááááí í áí í àéáòà èí òááðèèðí ááí í í é Ñðáá Û Chem.Office èèèpñòðèðóáòñý Óàèò "ì èèðí èðèñòàèèè÷áñéí é í ðááí èçàòèè" èáðáí èèè í èòðèèà èðáí í èý á òí ðí á ñèòðáí à=í ðáí èòèðí ááí í í é èáðáí èèè í èòðèèà èðáí í èý èàè ðáçóèüòàò í ðí áèòèðí ááí èý, í í ñéí èüèó í ðí áéáí Û èèááðí áðè÷áñéí áí í í áóí áá è òáóí í éí áèè í èòðèèà èðáí í èý èàè èáðáí è÷áñéí áí ì àðáðèèèà á Û èè èçèí æáí Û á ì í í í áðáòèè:

Ñ.Á.Éòò í èèí, Á.Ì .Í èñè÷áí èí, Á.É.Éí ò pèí á.Í áí ðááí è÷áñéí á ì àðáðèèèí ááááí èá (ñéí òáç, ñáí éñòáá, ì í ááèè, èèááðí áðèèèà).
Í í áí ñèáèðñé: Chem.Lab.NCD, 1997. 186Ñ.

Ðááèèçàòèý í ðí áðáí ì Û: Chem.Office/chem1.exe. Ááóí ð Û í áñòí ý Û ááí èññéááí ááí èý í ðèááðæèááðòñý òí áí ì í áí èý, ÷óí, ÷áí ì áí úáøá ì àèðí ñí á ñí ááðæèò í ðí áðáí ì à("áðó-æáñòááí í Ûé èí òáðóáéí"-ì èí èí àéáí), ÷áí áí èüøá í í èó÷ááòñý ñí Ûñéí ááy, áí àèèòè÷áñéàý èí òí ðí àòèý èç

í ðí áðàì ì Ù,òàì ì íí ýòí áá èññéááí áàòáèþ(í á ñí áòèàèèñóó á èí ì ì ùþ-òáðí Ùò ì ðí áðàì ì áò)í ðááèèà èáðÙ á èí ì ñòðóèðí ááí èá ì àðáðèàèà ì ðè ì èí èì àèuí Ùò í áàÙèáò òèì è-áñéí é áðàì í ðí ì ñòè,íí ñáðúáçí ì ñòè è í áñòí ýòáèuí ì ñòè ì í áòí áà è ðáçðáøáí èþ ì ðí áèáì í í é ñèòáòèè á í áèáñòè èí ì ñòðóèðí ááí èý ì àðáðèàèà.Áí ò ì í-áì ó áàòí ðÙ í áñòí ýÙ áé òáì Ù í á ì í áí óø-àèèñú ðáéí ì áí áí áàòú ýòè ì ðí áðàì ì Ù áèý DOS,ááá ì ðèýòí í ðááí òàðú ñí ñéí áéí Ùì è áí áèèòè-áñéèì è ì ðí áðàì ì àì è,í á í òýá-áí í Ùì è áèáí óñí áñéèì è ì áèðí ñàì è.

CHEM1 - ì ðí áðàì ì à ì í éáèóéýðí í áí ì í ááèèðí ááí èý èçí áðáæáí èý òèì è-áñéèò ááÙáñòáá 3-ò ì ðí ñòðáí ñòáá. ÁÙ ì í áèáðá áÙáðáòú í áí áòí áèì í á ì-èñéí è áèá àðí ì í á èç Í áðèí áè-áñéí é ÒááèèòÙ è ì ðí áðàì ì à í ðÙ Ù áò èí òí ðí àòèþ í á ýéáèòðí í í Ùò í ðáèòáèýò.Áðí ì Ù ì í áéí ì ñí ááèí ýòú á ì í éáèóéÙ, è ì í éáèóéÙ ñí ááèí ýòú ñ áðóáèì è áòí - ì àì è èèè ì í éáèóéáì è,-òí áÙ "ñéí ì ñòðóèðí áàòú" áí éáá ñéí áéí Ùé ááòáðí ááí í Ùé áàðèáí ò ì í éáèóéÙ.Òèì è-áñéèé í áúáì í ðí áðáæááðñý ì í ì áðá ááí ñí çááí èý,ááí ì í áéí ì í ðí ñí àððèáàòú á ðáçèè-í Ùò ì èí ñéí ñòýò è í áí ðááèáí èýò X-Y-Z á òí ì-èñéá è ì í ñòááñòáí ì áðáÙáí èý.Í í áèáèí èþ èí ì áí áÙ Hybrid è Ionize ì í áòò èñí í èúçí áàòúñý áèý òòí-í áí èý òèì à í ðáèòáèéé ì áðáá í áðáçí ááí èáì òèì è-áñéí áí ñí ááèí áí èý.Í í áéí ì í ñòÙáñòáèýòú çáì èñú, -òáí èá è ì ðí ñí í ðð á ì ðí áðàì ì á CHEM1 3-ò ì áðí í áí èçí áðáæáí èý,à òáèæá ì ðí ñí àððèáàòú ñí ðááí-í Ùá ÒáèéÙ èç ì ðí áðàì ì ðáí áá ñéí ì ñòðóèðí ááí í Ùò ñí ááèí áí èé.CHEMV - ì ðí áðàì ì à èí ì í áí úí í,èí òí ðáý ì í éáçÙáááò ì óéúòèì èèèàòèþ 3-ì áðí Ùò ì í ááèéé ñéí ì ñòðóèðí ááí í Ùò ì ðí áðàì ì í é.

Í í èñáí èý Òáèéí á:

CHEM1.EXE - ì ðí áðàì ì à òí ðí èðí ááí èý(ì ðí áðàì ì à çáÙèÙáí à í ò í áñáí èòèì-í èðí ááí í í áí áí ñòóí á í áðí èáì :1234567890.

CHEM.DOK-í í èñáí èá ÁÍ ÉÓÌ ÁÍ ÒÁ.

(C) Ñhem.Lab.IAS sak@stu.ru

Í ðí áðàì ì à ì í ñòðí áí èý ì èí ñéí ñòí í áí èçí áðáæáí èý òèì è-áñéí áí ì àðáðèàèà

í á í ñí í ááí èè í ñí ááí í í ñòáé ááí òèì è-áñéí áí ñòðí áí èý chem1.exe.

1.0 Áðí ì Ù è í ðáèòáèèè.

Áðí ì Ù ñí ñòááèáí Ù èç ýáðá è ýéáèòðí í í á èí òí ðÙ á í èðóáèþò ýáðí. Ýéáèòðí í Ù èí áþò òáí ááí òèþ è èí ì áéí áòèè á í ðáááèáò ñí ñòí ýí èé í áçÙáááì Ùò áòí ì í Ùì è í ðáèòáèýì è.

1.1 Òèì Ù àðí ì í Ùò í ðáèòáèéé.

Òèì è-áñéèéá í ðáèòáèèè ì í áòò áÙòú -s,-p,-d,-f òèì í á. ÉáæáÙé áòí ì èí ááò òí èúèí í áéí áèá -s í ðáèòáèè. Í ðáèòáèè ì í áòò ñí ááèí ýòúñý á èþáí ì í áí ðááèáí èè. -p í ðáèòáèè èí áþò òðè í áí ðááèáí èý(Px,Py,Pz). ÉáæáÙé áòí ì èí ááò ì ýòú -d í ðáè-òáèéé:Dxy, Dyz,Dxz,Dxx-yy è Dzz.

1.2 Áèáðèáí Ùá áòí ì í Ùá í ðáèòáèèè.

Áðí ì í Ùá í ðáèòáèèè ì í áòò í áúááèí ýòúñý,-òí áÙ òí ðí èðí áàòú ðáçèè-í Ùá òèì Ù áèáðèáí á í ðáèò:sp,dsp,sp2, è ò.á.. Óí ð-ì Ù,ì ðèí èì ááì Ùá áèáðèáí ì í ðáááèýþòñý í áí ðááèáí èýì è áòí ì - í Ùò í ðáèòáèéé,èí òí ðÙ à ì í áòò í áúáæí ýòúñý. Ñóí ðí èðí ááí í Ùá

æáðèàÙ ì ðí í óì áðí ááí Ù ñ ñèì áí èàì è:" ^ ~ + á ì ðí áðàì ì á
CHEM1. CHEM1 æèþ÷=àò í æèí òí ðÙá ñí àèèàèúí Ùá ááðñèè
sp2 è sp3 æáðèàí á,÷òí áÙ ááèàòù èí èüóááÙá ñòðóèòóóÙ áí -
èáá ì ðí ñòÙì è. sp2_5 è sp3_5 æáðèàÙ áí èæí Ù áÙáèðàòùñý
áñèè 5 àòì ì í á í áðàçóþò èí èüóí .Áñèè øáñòù àòì ì í á,òí èí èü-
óí èì áàò æáðèà:sp2 è sp3_6.

2.0 Ì í èáèóèýðí Ùá í ðáèòàèè.

Àòì ì í Ùá í ðáèòàèè èç ááóó è áí èáá àòì ì í á ì í áóó í áúááè-
í ýòùñý, ÷òí áÙ óí ðì èðí áàòù ì í èáèóèýðí Ùá í ðáèòàèè,èí ì í áí -
ñèðóáì Ùá ðàçèè÷í Ùì ì í àí ðááèáí èáì (áí òèí ðáèòàèè) ñí áðáí í Ùó
ýéáèòðí í í á,çàí èì àþÙèò í àèáí èáá í èçèí á ýí áðááðè÷=áñèí á
ñí ñòí ýí èá ì í ñðáàñòáí ì èí áàèáí óí í é ñáýçè.

2.1 Òèí Ùì ì í èáèóèýðí Ùó í ðáèòàèé.

Èí àþòñý òí èüèí òðè òèí à ì í èáèóèýðí Ùó í ðáèòàèé: $\sigma_{(7s_0)}$,
 $\pi_{(7p_0)}$ è $\delta_{(7d_0)}$. Sigma í ðáèòàèü óí ðì èðóþòñý, èí ááá
"èí í óÙ" àòì ì í Ùó í ðáèòàèéé í áðàçóþò òèí è÷=áñèóþ ñáýçù, è
òàèèì í áðàçí ì ñáí áí áí Ùá í ðáèòàèè ì í áóó áðàÙ àòùñý. Pi è
delta -ì í èáèóèýðí Ùá í ðáèòàèè óí ðì èðóþòñý ñí ááèí áí èáì
"áí èí áÙó ÷=áñòáé",à í á èí í óí á í ðáèòàèéé è òàèèì í áðàçí ì
ñáí áí áí Ùá í ðáèòàèè í á èì àþò áí çì í æí í ñèè áðàÙ àòù-
ñý.(CHEM1 Ááðñèý 4.0 í á æèþ÷=àò ì í èáèóèýðí Ùá í ðáèòà-
èè òèí à-delta).

3.0 Ñí ááèí áí èá

Óèí è÷=áñèí á ñí ááèí áí èá èì áàò ì áñòí ,èí ááá í áðàçóáòñý í àè-
áí èáá í èçèí á ýí áðááðè÷=áñèí á ñí ñòí ýí èá èí ì áèí àòèé ýéáèò-
ðí í í á àòì ì í Ùó í ðáèòàèéé. Èç áí èüøí áí èí èè÷=áñòáá áí çì í æ-
í Ùó ñí ááèí áí èé ðááèèèçóáòñý èí í òèáóðáòèý ñí àèì áí üøèì
ýí áðááðè÷=áñèèì ñí ñòí ýí èáì .

3.1 Ñí ááèí áí èá Ýéáèòðí í í á.

Í áÙ÷í í èáæáÙé àòì ì í òáááò ýéáèòðí í äèý í áðàçí ááí èý èí í -
í í áí ñí ááèí áí èý. Áñèè àòì ì í òáááò í áá ýéáèòðí í á, ýòí í à-
çÙáááòñý áàòèáí í é ñáýçùþ. Èí í ááá ñí ááèí áí èá í áðàçóáòñý
í ðè èí èáèèçáòèè áí òè-ñí ááèí ýþÙáé í ðáèòàèè.

3.2 Í í ðýáí é Ñáýçè.

Í í ðýáí é ñáýçè í í ðáááèýáòñý ÷=èñèí ì í àð ýéáèòðí í í á á ñí á-
àèí áí èè í ðáèòàèéé ì èí óñ ÷=èñèí í àð ýéáèòðí í í á á áí òèñí á-
àèí áí èè.

4.0 Ðàçì áð àòì ì í á.

Ðàçì áð àòì ì í á èçì áí ýáòñý ñ òèí ì ì æáðèàá è ñí ááèí áí èý.
CHEM1 èì áàò áñòðí áí í óþ òááèèòóó àòì ì í Ùó ðàçì áðí á ñí á-
èáñí í í ðáèòàèèí ì ò òèí ó è í í ðýáéó ñáýçè. Ýòà èí óí ðì áòèý
í ðèí èì àèáñü èç í áøèðí Ùó ñáí áí é Ñ.Ñ.Áàòáí í áá.

5.0 Èí í í í á ñí ááèí áí èá.

Ðýà àòì ì á èì áþò ñèëúí óþ ýéàèððí ñòàðè-áñéóþ òáí ááí òèþ (ýéàèððí òðèòàðàèúí òòù), ÷òí áú ñí áàèí ýòùñý ñ àòì ì àì è ì á- í áá ýéàèððí òðèòàðàèúí úì è. Òàè í áðàçóàòñý èí í í á ñí áàèí á- í èà. CHEM1 èì áàò àñòðí áí í óþ òàáèèóó àòì ì í á ñ ðàçèè÷- í í é ýéàèððí òðèòàðàèúí òòùþ, ÷òí áú ñí çààáàòù òèì è÷-áñèèà ñí áàèí áí èý ñ èí í í í é ñáyçùþ. Í òðèòàðàèúí úá èí í ú èì áþò áí èüøèà ðàçì áðú òí òí ò ó, ÷òí í í è í í éó÷èèè áí í í èí èðàèúí úé ýéàèððí í . Í í èí æèðàèúí úá èí í ú èì áþò ì áí üøèà ðàçì áðú èàè ðàçóèüòàò òí òàðè ýéàèððí í à.

Í ðèì áðú òí ñò ðí áí èý òí í éàèóèýðí í é ñò ðóèò óðú ò àò áðèàèà í à òí èí ñèí ñò è èí ðèì áðú áúáà÷è òàèéí á àèý òí ðí ñò áéøèò áúáñò á.

Í ÐÍ ÁÐÁÍ Ì Û: chem1.exe è chemv(í àðí èü:1234567890).Ááðñèý 4, 1998

CHEM1 -í ðí áðàì ò à òí í éàèóèýðí í áí òí í áàèèððí ááí èý àèý èí í ñ- òðóèððí ááí èý 3-ì áðí úò èçí áðàæáí èé òèì è÷-áñèèò ñí áàèí áí èé. Áòí ò ò ñí áàèí áí èý áúáèðàþòñý èç Í áðèí àè÷-áñèí é Òàáèèòù, èñ- òí í èüçóý èí òí áí áó A è ýéàèððí í í úá í ðáèðàèèòí í í áèááí í í é èí - òí ðí àòèè. Áòí ò ò ñí áàèí ýþòñý (èñí í èüçí ááí èà èí òí áí áú B). Í í òí áðà ñí çàáí èý òèì è÷-áñèí áí ñí áàèí áí èý ány èí òí ðí àòèý í òí áðàæáàòñý í à ýéðáí á. Èñí í èüçóý èèþ÷è-éóðñí ðú è èí í áí áó V í áúáí ñí áàèí áí èý òí í áèàò òí ðí ñí àððèáàòùñý èç ðàçèè÷ í úò í áí ðàáèáí èé. Í ðè èñí í èüçí ááí èè èí òí áí á Hybrid è Ionize òí í - áòò èí í ñòðóèððí áàòùñý í áí áóí àèì úá òèì ú óúèì è÷-áñèí é ñáyçè. Áòí ò ò òí í áòò ñí áàèí ýòùñý á áðóí òí òí, òí áàá áðóí òí òí ñí áàèí ýá- òí úá ñ áðóáèì è áðóí òí àì òí í çáí èýþòí í í éó÷-àòù èðàéí á ñèí æí úá òèì è÷-áñèèà ñòðóèððí. CHEMV -í ðí áðàì ò à- èí òí í áí úí í , èí òí ðáý òí í èàçúáàò òí óèüòèì èèèàòèþ 3-ò òí áðí úò òí í áàèèà è ñèí í ñòðóèððí ááí í úò CHEM1.

CHEMV í áí èñáí á Óóðáí -Í àñèàèà ñ ÁÁÍ ÁÍ Ì -ÁÚÁÍ - ÁÍ Ì áðàòèèè. Èñí í èüçí áàòù CHEMV òí ñòí .Í à÷-èí áþò òí ðí á- ðàì òí ó è áúáèðàþò æáèàðàèúí úé Òàèé. Í ðè èñí í èüçí ááí èè CGA áí í í èí èðàèúí úé í ááí ð ñèì áí èí á áí èæáí çááðóæàòùñý èñ- òí í èüçóý èí òí áí áó GRAFTABL DOS. Áúáí ð ñáyçè òí òí òí í è÷-áí èþ áóáàò òí ðí èðí áàòù èí èüòí . Òàèèì í áðàçì òí ñí çááí èà ñòðóèððí èí èüòà òðááóáò áúáí ðà ñí í òááòñòáóþúáé áèáðèàèçàòèè è èñ- òí í èüçí ááí èý èèààèøè RETURN Èí òí áí áú áèý ááðñèè 4.00 Ñhem1: A - Ýòà èí òí áí áà òí òí áðàæáàò òí áðèí àè÷-áñéóþ òàáèè- òó.

Ýéàì áí òú áúáèðàþòñý, òí áðàì áúáý éóðñí ð é æáèàðàèúí òí ó ýéàì áí òó, çàðàì ENTER. Èèààèøè à Esc èñí í èüçóáòñý àèý áúòí áà èç ýòí é èí òí áí áú.

B - (Ñáyçù) Ýòà èí òí áí áà èñí í èüçóáòñý ÷òí áú ñí áàèí ýòù áàá àòì òí à. Ñí èñí é áñáò áúáðáí í úò àòì òí í á òí áðàæáàòñý í áðýáò ñ ýéàèððí í í í é í ðáèðàèúí í é èí í òèáòðàòèáé.

Ðàçì áð àòì òí à òí ðáááèýáòñý òí ðè í áðàçì ááí èè ñí áàèí áí èý.

C - (Óàáèáí èà) Ýòà èí òí áí áà òí ÷èúáàò ýéðáí è áóÓáð àèý áñáò àòì òí í á è ñí áàèí áí èé. ÁÁÍ ÁÓ á òí áí þ èñí í èüçóáòñý àèý òí ÷èñòèà áóÓáðà.

FB - (ÁóÓáð Í ðí ñí òðí á) Ýòà èí òí áí áà ñí òðáí ýáò áóÓáð òí í á èì áí àì òàèèà TEMP.DAT, ÷òí òí í çáí èýáò òí ðí ñí àððèáàòù òí ðí áðàì òí ó-ñí ááðæáí èà òàèèà.

FH - Í î éaçÚààpò ñî ðàâî ÷í Úé Ôàéè.

FM - Ì éí èì èçèðòpò ðaçì áð Ôàéèà, óàèÿÿ í àèñî ì èüçóàì Úà ì ð-
 àèòàéè. Í á èñî ì èüçóéòà ÿòò èì ì áí áó, ì í èà í á í í éí ì ñòùp
 àÚì ì éí áí Ú àñá ì ì áðàòèè, ðàè èàè áí ì ì éí èòàèüí Úà ñàÿçè
 í á ðààèèèçòpòñÿ á ì éí èì èçèðì ààí í ì ì Ôàéèá.

FR - ×òáí èà ðèì è÷àñéí áí Ôàéèà.

FS - Í î áðàòèí í í àÿ Ñèñòáì à.

FT - Í î éaçÚààpò Óàéè Í áó÷àpÚáé Í ðì áðàì ì Ú.

FV - Í ðì ñì àòðèààpò Óàéè èç àèñèà.

FW - Çàì èñÚàààò Óàéè í à àèñè.

G - (Áðóí ì à) Ýòà èì ì áí àà èñî ì èüçóàòñÿ àèÿ ì ðèñî áàèí áí èÿ
 áðóí ì Ú àòì ì ì á, ì í éó÷àpÚèòñÿ ì ðè èñî èüçì ááí èè èì ì ì áí àÚ
 Bond. Í àèí àòì ì ì èç áÚáðáí í í é áðóí ì Ú
 ì ðèñî áàèí ÿàòñÿ è àòì ì ó ì ðààààðèòàèüí ì áÚáðáí í í é
 áðóí ì Ú. Í í ààÿ áðóí ì à ì í æàò áðàÚàòñÿ áí èðóá X, Y,
 èèè Z ì ñàé ì ðàæáá, ÷áì ÿòì ì ðèñî áàèí áí èà áóáàò èì àòù
 ì àñòì .

H - (Áèáðèà) Ýòà èì ì áí àà èñî ì èüçóàòñÿ àèÿ àèáðèàèèçàòèè
 ÿèàèòðì í í Úò ì ðàèòàèèáé. Ñì èñî è áí çì ì æí Úò àèáðèáí á
 ì òì áðàæàòñÿ. _5 èèè _6 ì éí ì ÷áì èà óéàçÚàààò ÷òì óàèÚ
 ñì áàèí áí èÿ áðàÚàèèñù ÷òì áÚ ààèàòù 5 èèè 6 -ì áðàçì Úà
 èí èüòà ñàÿçè.

I - (Èí í èçàòèÿ). Ýòà èì ì áí àà èñî ì èüçóàòñÿ àèÿ òì ðì èðì àà-
 í èÿ èí í èçèðì ááí í í áí àòì ì à. Ñì èñî è áí çì ì æí Úò òì ðì èí -
 í èçàòèè ì òì áðàæàòñÿ.

MA - (Í áðàì áÚáí èà) Ýòà èì ì áí àà èñî ì èüçóàòñÿ, ÷òì áÚ áðó÷í òp
 ì áðàì áÚàòù àòì ì èèè áðóí ì ò.

MC - Èçì áí ÿàò(Çàì áí ÿàò) óààò àòì ì à. Óààò àñáò
 àòì ì ì á áÚáðáí í í áí ðèì à ì ì æí ì èçì áí èòù.

MD - Óàèÿàò áÚáðáí í Úé àòì ì èç ðàéóÚ ááí áóóáðà. Ýòà
 èì ì áí àà í àèáí èáá ì í éaçì à àèÿ ì ì àèòèèàòèè ñòÚ àñòáòp-
 Ú ááí Óàéèà á Ñhem1.

MX - ÁðàÚàpò àòì ì Ú áí èðóá X ì ñè. Í á èñî ì èüçóéòà èpáòp
 èç áðàÚàpÚèò èì ì áí á, ì í í èà í ááí ð óàèí á ì ì èàéóèÚ í á ì í éí ì .
 Óáí è àèÿ ñàÿçáé ñààèáí í Úò ì ì ñèá áðàÚáí èÿ(òèèèè÷àñéí áí
 ñààèàà) í á ì ì æàò áÚòù ì ðààèèáí .

MY - ÁðàÚàpò àòì ì Ú áí èðóá Y ì ñè.

MZ - ÁðàÚàpò àòì ì Ú áí èðóá Z ì ñè.

R - (Í á í à ì áí p) ×òáí èà ÷òì áÚ áóóáðèèçì áàòù èç TEMP.DAT

SB - Í áðàèèp÷àòàèè ñì áàèí ÿpò ñòðì èè àèè\áÚèè.

SE - Í áðàèèp÷àòàèè áí ì ì éí èòàèüí ì áí ì ðì ñì ì ððà àèè\áÚèè.

SG - Í áðàèèp÷ààò ñàòéó àèè\áÚèè.

SN - Í áðàèèp÷ààò í óì áðàòèp àòì ì ì áàèè\áÚèè.

V - (Í ðì ñì ì òð) Ýòà èì ì áí àà áóáàò ì ì éaçÚààòù ì ðì ñì ì ðð ñì á-
 àèí áí èÿ á Ñhem1, èí òì ðÚé áÚáðáí èèààèøàì è ì áðàì á-
 Úáí èÿ éóðñì ðà áàáðò\áí èç.

Áí ðèçì í òàèüí àÿ è ááðòèèàèüí àÿ ì ñù ì ì éaçÚààpòñÿ á
 ì ðàáì ì ááðóí áí óàèá ÿèðáí à. Ñòðì èè èàè ì ì éaçÚàààòñÿ
 óéàçÚààpò ñàÿçè. Í ðàáÚé ááðóí èè óáí è ÿèðáí à

í î êàçÛâàðî î ñü (X, Y, èèè Z) è åå í àî ðàåéåí èå.

W - (Çàî èñü) êî ì àí àà Write çàî èñÛâàððò áóôåð è ôàééó
TEMP.DAT,í î í á à ì àí ð!!!Êî ì ì àí àà Read-÷èðàé ì î æàò
èñî î èüçî åàòüñý æëý àí ñòàí àåéåí èý,í àí ðèî åð,í øeåèè á
êî ì ñòðóêòóèè ì ðî àðàî ì Ñhem1.

Í ðèî åð 1: Ñêî ì ñòðóêòóéðà ì î èåééó áî àÛ.

- 1) Êñî î èüçóéðà êî ì àí áó A ÷òî áÛ ì î êàçÛâàððò î åðèí àè÷åéóð
òàåéèóó.
- 2) ÅÛâàððèðà O, H, è H î óòàî èñî î èüçî åàí èý èèåèèø éóðñî ðà è
èèåèèø è ENTER.
- 3) Êñî î èüçóéðà Esc ÷òî áÛ àÛòî àèðü êî ì àí àà A.
- 4) ÅÛâàððèðà Êî ì àí áó Bond.
- 5) ÅÛâàððèðà O è H.
- 6) ÅÛâàððèðà î áÛ àåí ñòîí í í óð ñâýçü (í î óî î è÷àí èð).
- 7) ÅÛâàððèðà î àí ó èç ñâýçåé O-H.
- 8) Êñî î èüçóéðà Êî ì àí áó Bond, ÷òî áÛ àèèèòü åðóáóð ñâýçü O-H.

Í ðèî åð 2: Ñî ððàí àí èå í à àèñèå.

FW Áóôåð Çàî èñü ôàééà í à àèñè.

sitrans.dat = Êî ÿ

Ôàééè Si3N4-î ðèåí ðèðî ààí í î àí ñèòðàí à.

FM Êî ì àí àà ì èí èò èçàòèè ôàééè.(åÛâàððèðà H2O ôàéé).

Ôàéé ñî ððàí àí í óé í à àèñèå àÛæýæèð àè:

Êæææý î ðàèòàèü î ðàñòàèèåýàòñý ñòðî èí è í î á÷àí í î é chemical
è ñî àåðæèð í î åð ÅÛàí ðà, Êî ÿ Atom, î ðàèòàèèí î à èò ÿ, ÷èñèí
ýææèðî ì î à à ýòè é î ðàèòàèèèè, ðèí ñâýçè (àñèè ñî ààèí ýàòñý), è í î åð
ñî ààèí ýàí î àí àòî ì à. ÊææÛé àòî ì èò ààò ñòðî éó í î -
î á÷àí í óð atomlocation î ðààí ñòàèéåí èåí : X, Y, Z êî ì ðàèí àòÛ,
radius, X, Y, Z óàí è àðàòàí èý(èèèèè÷èñèí àí ñàèèèè) àòî ì à, è
òààòà àòî ì à (í î ñèåèí àà óàèí á ÷èñèí èñî î èüçóèðñý àí óòðàí í á
à î ðî àðàî ì á).

chemical_name("Si3N4-î ðèåí ðèðî ààí í î óé ñèòðàí ")

- chemical(a(7,"N",o("3p(y)",1,"ó",6)))
- chemical(a(6,"Si",o("3p(y)",1,"ó",7)))
- chemical(a(3,"N",o("ion",1,"ó",6)))
- chemical(a(6,"Si",o("ion",1,"ó",3)))
- chemical(a(7,"N",o("ion",1,"ion",6)))
- chemical(a(6,"Si",o("3p(x)",1,"ó",7)))
- chemical(a(7,"N",o("3p(x)",1,"ó",6)))
- chemical(a(4,"Si",o("3p(z)",1,"ó",3)))
- chemical(a(3,"N",o("3p(z)",1,"ó",4)))
- chemical(a(5,"N",o("ion",1,"ion",4)))
- chemical(a(4,"Si",o("ion",1,"ion",5)))
- chemical(a(3,"N",o("3p(y)",1,"ó",4)))
- chemical(a(4,"Si",o("3d(a)",1,"ó",3)))
- chemical(a(2,"Si",o("3p(y)",1,"ó",1)))
- chemical(a(1,"N",o("3p(x)",1,"ó",2)))
- chemical(a(2,"Si",o("ion",1,"ion",3)))
- chemical(a(1,"N",o("ion",1,"ion",2)))
- chemical(a(2,"Si",o("ion",0,"no",0)))
- chemical(a(7,"N",o("3p(z)",2,"no",0)))

chemical(a(6,"Si",o("3s",0,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3p(z)",2,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3p(y)",2,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3p(x)",2,"no",0)))
chemical(a(4,"Si",o("3p(y)",0,"no",0)))
chemical(a(4,"Si",o("3p(x)",0,"no",0)))
chemical(a(4,"Si",o("3s",0,"no",0)))
chemical(a(3,"N ",o("3p(x)",2,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3p(x)",0,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3s",0,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("3p(z)",2,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("3p(y)",2,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("2s",2,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("3d(a)",0,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("3d(b)",0,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("3d(c)",0,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("3d(d)",0,"no",0)))
chemical(a(1,"N ",o("3d(e)",0,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3p(z)",0,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3d(a)",0,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3d(b)",0,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3d(c)",0,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3d(d)",0,"no",0)))
chemical(a(2,"Si",o("3d(e)",0,"no",0)))
chemical(a(3,"N ",o("2s",2,"no",0)))
chemical(a(3,"N ",o("3d(a)",0,"no",0)))
chemical(a(3,"N ",o("3d(b)",0,"no",0)))
chemical(a(3,"N ",o("3d(c)",0,"no",0)))
chemical(a(3,"N ",o("3d(d)",0,"no",0)))
chemical(a(3,"N ",o("3d(e)",0,"no",0)))
chemical(a(4,"Si",o("3d(b)",0,"no",0)))
chemical(a(4,"Si",o("3d(c)",0,"no",0)))
chemical(a(4,"Si",o("3d(d)",0,"no",0)))
chemical(a(4,"Si",o("3d(e)",0,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("2s",2,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3d(a)",0,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3d(b)",0,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3d(c)",0,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3d(d)",0,"no",0)))
chemical(a(5,"N ",o("3d(e)",0,"no",0)))
chemical(a(6,"Si",o("3p(z)",0,"no",0)))
chemical(a(6,"Si",o("3d(a)",0,"no",0)))
chemical(a(6,"Si",o("3d(b)",0,"no",0)))
chemical(a(6,"Si",o("3d(c)",0,"no",0)))
chemical(a(6,"Si",o("3d(d)",0,"no",0)))
chemical(a(6,"Si",o("3d(e)",0,"no",0)))
chemical(a(7,"N ",o("2s",2,"no",0)))
chemical(a(7,"N ",o("3d(a)",0,"no",0)))
chemical(a(7,"N ",o("3d(b)",0,"no",0)))
chemical(a(7,"N ",o("3d(c)",0,"no",0)))

chemical(a(7,"N",o("3d(d)",0,"no",0)))
chemical(a(7,"N",o("3d(e)",0,"no",0)))
atomlocation(1,l(1501,-2036,171,1.56,6.2832,6.2832,6.2832,14),1)
atomlocation(2,l(1449,764,-29,0.4,0,0,0,4),1)
atomlocation(3,l(-1099,764,-29,1.56,0,-3.14159265,0,14),1)
atomlocation(4,l(-1099,-1784,-29,0.4,1.57079633,0,4.712387211,4),1)
atomlocation(5,l(-1099,764,-29,1.56,4.712387201,0,1.57079633,5),1)
atomlocation(6,l(1449,764,-29,0.4,0,0,0,4),1)
atomlocation(7,l(-1099,764,-29,1.56,0,-3.14159265,0,5),1)
commandactive("Files")
viewshown("Bak")
grid(10)
atom_count(8)
valencelist(2,0,4)
valencelist(2,0,4)
valencelist(2,0,4)
valencelist(2,0,4)
valencelist(2,0,4)
valencelist(7,0,-3)
valencelist(7,0,-3)
valencelist(7,0,-3)
valencelist(6,0,4)
valencelist(6,0,4)
valencelist(6,0,4)
valencelist(6,0,4)
valencelist(5,0,-3)
valencelist(5,0,-3)
valencelist(5,0,-3)
valencelist(4,0,4)
valencelist(4,0,4)
valencelist(4,0,4)
valencelist(4,0,4)
valencelist(3,0,-3)
valencelist(3,0,-3)
valencelist(3,0,-3)
valencelist(2,0,4)
valencelist(2,0,4)
valencelist(2,0,4)
valencelist(2,0,4)
valencelist(1,0,-3)
valencelist(1,0,-3)
valencelist(1,0,-3)

Çaðàì óéàçàí í Ûé Òàéé ì îæâð áÙòù ì ðî ñî îððáí á îáúâì á êî ì áí âî é
chemv.com á ôî ðî á ì óëüðèì èèèàöèè,ó-èòàâàðùéé òàðàèòàð
âàèâí òí îâî àçàèì îââéñðàì ÿ.

Ëðèñò àèèè-âñèàÿ îðèáí ò àòèÿ ñèò ðàí á ì ðî âèðèðóáòñÿ ì ðî áðàì ì î é
chemstr.exe,â ñòðîéó êî òî ðî é ì ðèàèàøâàòñÿ ì ðî àèòèðóáì Ûé
Òàéé:Si3N4.str.Óéàçàí í àÿ ì ðî áðàì ì à òàèæâ çàùèùáí à
ì àðî èâì (123456789).

Ðóèî âî àñðàí ì î CHEMSTR -ì ðî áðàì ì á

(Ëî ì ñòðóèðî ààí èà èðèñòàèèè-âñèî é ñòðóèðóðù).Ãâðney 4.4.

I. Í áúèé

CHEMSTR - í ðí áðàí ì à äëý éí í ñòðóèðí áàí èý è í á÷àòè 3-ì áðí Ùò èðèñàè-

èè÷áñéèò è ì í èáéóëýðí Ùò ñòðóèðóðð. Ðáàèèçàòöèý èì ááò ì áñòí í á á äáèàðòí áñéèò éí í ðáèí àòàð è í í òí ò í ó í í áðàòèè ñèì ì áððèè á èðèñ-òàèí áðàòèè áúñòðí òðáí ñèèððòòòý í à ýçÙé í ðí áðàí ì Ù. Ðèñóí èè PostScript, í í éó÷áí í Ùá MV-í ðí áðàí ì í é ñí àí áñòèí Ù ñ òí ðí àòí ì EPS è ì í áóð èì í í ðòèðí áàòúñý í àèáí èüøèì éí èè÷áñòáí ì òáèñòí áúò í ðí -òáññí ðí á.

Óàéè í í ðáááèáí èý ñòðóèðóðð Ù í óáí í ááààòü èàè í áðàí áðð éí ì áí áí í é

ñòðí èè:

chemstr <filename >

Ðáñøèðáí èà í í òí í è÷áí èð: ".str".

II. Óí ðí àò òáéèà" ÑòðóèðóððÙ".

Ñòðóèðóððí Ùá áàí í Ùá ÷èðàðòòòý èç òáèñòí áí áí Òàéèà á í à÷àèá í ðí á-ðàí ì Ù. Çáññü ñí ááðæèòòý ááà áèàá éí ì áí á áàí í Ùò: í ðí ñòí á èçèí -æáí èá éí ì áí á á í áí í é ñòðí èá è áèí èàð áàí í Ùò, í à÷éí àðÙèòòý çà-áí éí áèí ì áèí èà è çàèáí ÷èààðÙèòòý í òñòí é ñòðí éí é. Í í ì áðà è èèð-÷ááúá ñèí áà í òááëýðòòý ñí ðí ááèàì è èèè çàí ýòùì è. Çí áè:" * " èñí í èüçóáðòòý èàè ðáçááèèòàèü éí ì ì áí òàðèý (èðáí é òáèñò í í ñèá ýòí èáí í ðèðóáòòý). Ñèí òáèñè÷áñéèé áí áèèçàòí ð éí ì áí áú í ðèí èì á-áò í áí áí í çí á÷í Ùá ñí èðàúáí èý äëý áñáð éí ì áí á, i.e sy çàí áúááò "ñèì ì áððèð" è ò.á..

--- í áðàúá ááà ñòðí èè Òàéèà í í ðáááëýðòòè ñèñòáì ó éí í ðáèí àò (ýèáí áí òàðí í é ý÷áéèè):

à b c

àèüòà(_7a_0),ááòòà(_7b_0),áàì ì à(_7g_0)

Ááà à,b,c èçì áðýðòòý á áí áñòðáì àò è óáèÙ á áðàáóñàò.

--- í í çèòèè àòí ì í á çàáàðòòý á áèí èá àòí ì í á:

atoms

x1 y1 z1 type1 [name1] * (òáèñòí áúá í áðàí áððÙ

í àòí äýòòý á ñèí áèàò) x2 y2 è ò.á....

Ááá "type" èñí í èüçóáðòòý äëý óáàòà è ðáçì áðà, è "name" äëý ñáý-çè ì áæáò àòí ì àì è. ÉàæáÙé atom áí èæáí èì áòü óí èèàèúí í á(ñí áñ-òááí í í á) èì ý. Èì ýì í áæáò áúòü áí ó ñèì áí éí á áèèí í é, í òñòúá èì á-í á í í çáí èýðòòý äëý atoms(àòí ì í á),éí òí ðúá í á ñí ááèí ýðòòý òèì è-÷áñéèì è ñáýçýì è.

Í í ðáááèáí èý ÑÁBÇÈ ---:

Ñâyçè
Name1 name2 [type1]
Name3 name4 [type2]
Ë ò.ä....

"type" Òàéóëüòàòèâáí -í âí áýçàòàèäí ,í í èñí î ëüçóáòñý äëý óâòà ñâyçè àòí î í â(atoms).

--- Óââòà è ðàçì áðÛ:

Ñâí éñòââ
Type1 color1 [size1] [psgray1]
Type2 color2 [size2] [psgray2]
...

"Óââò" - óââò àòí î à è size-"ðàçì áð" àòí î à- àèàì àòð á áí ãñòðâ-
ì àò.ðàçì áð í î òí î è÷áí èþ - í óëü.

Óââòà - (VGA):

×áðí Ûé, ñèí èé, çäèáí Ûé, ñèí èé, èðãñí Ûé, ñèðáí áâÛé, êí ðè÷í áâÛé,
(èàðèí èçèðí áàí í Ûá í àçàáí èý î òàáí êí â:lightgray,darkgray,lightblue,
lightgreen,lightcyan,lightred,lightmagenta,) æäèòÛé, áâèÛé-ãñà
óââòà ãñòàäëýþòñý á èàðèí ñèí é òðáí ñèðèí òèè.

Í àðàì áòð psgray - óðí ááí ù ñáðí áí PostScript (0-1) èñí î ëüçóáì Ûé
á í àí á÷àòàí í îí èçí áððäæáí èè. Áñèè ÿòí î òñóòñòáóâò, ÿòí áóáâò
í î ðááäëýòñý í ðí áðàì î í é ñàì í òòí ÿòáëüí í á Óóí èòèè óââòà ÿèðáí à.
"size-ðàçì áð" è psgrey - ááç ÿÓÓâèòà í à ñâyçÿò.

--- î í áðàòèè Symmetry î ðáãñòàäëýþòñý êí î áí áí é:

Ñèì î àòðèý

Çããããòñý ñí èñí é í ðáí áðàçí áàí èé ñèì î àòðèè. Èãæããý ñí áòèòèèàòèý
ñèì î àòðèè í à÷èí áàòñý í áí í áóéááí í Ûì èãáí òèòèèàòí ðí î .×èñí
òàèèò

í ðáí áðàçí áàí èé ðáááí òðáì : s, m, r

s ax ay az bx bz [store]

Óðáí ñòí ðí èðóáò x é ax * x + bx, y é ay * y +by,z é az *z +bz.

m ax ay az bx bz [store]

m-ãñòü î áðí áí äèéóéýð é áâèòí ðó (ax,ay,az),

ñí î ðí áí æããáí Ûé òðáí ñèýòèáé (bx,bz).

r ax ay az bx bz m [store]

Í î ðááäëýáò î ñü áðàÛáí èý(òèèèè÷ãñèí áí ñããèãã)í òí î ñèòáëüí î

(ax,ay,az) í î ðýäèà m ñòáí áí è (360/m), ñí î ðí áí æããáí Ûé

òðáí ñèýòèáé (bx,bz).

Áñá í ðáí áðàçí áàí èý í ðèì áí ÿþòñý òí ëüèí é í à÷àëüí î í ó í ááí ðó ñây-

çáé,áñèè èèþ÷ááí á ñèí áí "í àí ÿòè" í á í ðáãñòàäëáí í. Ýòí çãñòà-

èýáò í ðí áðàì î ó í î áÛàòü áñá í í áÛá í í çèòèè ñí çãáí í Ûá ñèì î àòðèáé

í áðàòí í á áóóáð ááí áí á, í í ÿòí î ó í î ñèããóþÛèá í ðáí áðàçí áàí èý áó-

áóò áãéñòáí áàòü òàéæá í à ÿòè í í áÛá ÿèáí áí òÛ. Áðóáèè è ñèí áàí è,

ÿòí áóáâò çãñòàäëýòñý î ðí áðàì î ó ááí áðèðí áàòü áñá í ðáí áðàçí áàí èý

āī āđāāē "ī āī yōūp" . Í āī đēī āđ, āñēē āŭ ēī āāōā ī ī ēāēōēō ñ ōāī ò-
đī ī ēī āāđñēē ā (x,y, z), ñī ēñī ē ñēī ī āđđēē ī ī æāđ í ā÷ēī āđūñý ñ:
S - 1 -1 -1 2x 2y 2z ī āī yōū
(Ñī . òēī ī āŭā āēēp÷āī í ŭā ōāēēŭ)
Í āāī đŭ āāī í ŭō: ---
Ēī ī āī āā(āāī āēōñý ēāđēī ñēī ā í āçāāī ēā):
Í ī āŭē(āāī āēōñý ēāđēī ñēī ā í āçāāī ēā):
Ēī ñđōēōēđōāđ ī đī āđāī ī ó- í āī āāēāī í ī ī āđāāđŭāāđŭ āāī í ŭā ēç
āđī ī ī ā, ñāyçāē ē ñī ēñēī ā ñēī ī āđđēē ē ī ī āđī đī ī ēī ēōēāēēçēđī āāđŭ
ñī ī ōāāđñōāđŭ ēē āóōāđ. ("Ñāī ēñōāā"- í ā ēī ēōēāēēçēđōđŭñý ē
āī ēāē ŭ ī ī yāēyđŭñý ī āđāā ēī ī āī āī ē 'new'). "Í ī āŭē"- āī ēāāī
āñāāā ñī ī đī āī āāāđŭñý āđōāēī ñī ēñēī ī āđī ī ī ā. Ýđā ī ñī āāī í ī ñđŭ
ī ī æāđ āŭōŭ ī ī ēāçí ā ēī āāā đāçēē÷í ŭā ī ī ēāēōēŭ ēī āđŭ đāçēē÷í ōđ
ñēī ī āđđēp.
--- ñī ēñī ē ý÷āāē çāāāāđñý:
B÷āēēē
H1 k1 l1
H2 k2 l2
Ē ò.ā....
B÷āēēā 0,0,0 ñī çāāāđñý ī ī ōī ī ē÷āī ēp ē í ā āī ēāē ā āēēp÷āđūñý.
Ōāēōŭ āy āāđñēy ī ī āāāđæēāāāđ ōī ēŭēī ī đī ñđŭđ đāđāđēō, í ī āđōāī ē
āāđēāī ō(fc, bc) ī ī æāđ ñī çāāī ī āŭyāēāī ēāī ōđāī ñēyōēē ēāē ī ī ā-
đāōēē ñēī ī āđđēē.
--- ōī đāāēyđŭ ē ēī ī āī āŭ ī ōī āđāāēāī ēy
Í ñŭ ax ay az
Ōāī đđēđŭēđā cx cz
Ýōē ēī ī āī āŭ ī ī đāāāēyđŭ ī ñŭ ē ī ōī āđēō ī ōī ī ñēōāēŭī ī ēī ōī đī ē āŭ
āóāāōā āđāŭāđŭ ñēñōāī ō ēī ī đāēī āđ ī đē āŭāī đā í āī đāāēāī ēy ī đī ñ-
ī ī đđā. Çí ā÷āī ēy ī ī ōī ī ē÷āī ēp: 0 0 1 (z ī ñŭ) ē 0.5 0.5 0.5.
Ōđāēī í ā
Ōđāēī ī ò
Ōđāēī āñā
Āŭāēđāāđ āđāī ēōŭ ý÷āēēē ēī ōī đŭā í ōāēī ī āŭāāñđē: 0,0,0 (í ā), í ē
ī āēī (í ò) ēēē āñāđ ý÷āāē.
Í ī ōī ī ē÷āī ēp āēēp÷āī .
--- ī ā÷āđāđŭ ōñōāī ī āēō
pictureframe í ā
pictureframe ī ò
Í āđāī ē÷āī ēy ī ōñā÷āī ēy āóāōđ ī ī yāēyđŭñý (í ā) ēēē í ā (í ò). Í ī
ōī ī ē÷āī ēp āēēp÷āī .
Ēāī āđāōđ
Ēçī āī yāđ(çāī āī yāđ) ī đēāī ōāōēp āŭāī āā PostScript ē ēāī āđāōđ.
--- āđōāēā ēī ī āī āŭ
MV āŭī ī ēī yāđ í āēī ōī đŭā ī ī òēī ēçāōēē, ēī ōī đŭā āŭ ī ī æāđā āŭāī -
đī ÷í ī āŭēēp÷ēōŭ āñēē āŭ í āđī āēōā ÷ōī ī āđāāī ōēā āāī í ŭō āāđāđ
ñēēðēī ī āī ēŭðī ā ēī ēē÷āñōāī āđāī āī ē.

specials ī ò
specials í ā
specials āñā (í ī ōī ī ē÷āī ēp)

Éí áää ñòðí èà ì áðñáèääò óáí òð àòí ì à- ýòí áóääò çàçí ð á áää
÷àñòè. Áúáí ðú éí ì áí áú,éí òí ðúì è "ñí áöèàèüí úá" ì í çèèèè àòí ì à
ðáññí àòðèääþòñý:" Í è í àèí (í ò), òí èüéí óçèú ðáøáðèè (í à) èèè
áñá àòí ì ú í á ì í áóò í ðí ááðýòúñý". Ýòá í í òèý í á èí ááò í èèàéí é
ýòóáèò,áñèè í ñè í á áúáí áýòñý (óðáéí í ò).

Çàçí ð x

Ì àèñèì àèüí àý àèèí à áúáááí í í é ñòðí èè - x (á áí áñòðáì àò). Áí -
èää àèèí í úá ñòðí èè áóáòò èì áòú çàçí ð á áí èää éí ðí òèèò ñááì áí -
òàð.

III Í ðí ñí í òð è í á÷àòú.

Í áí ðàáèáí èá ì ðí ñí í òðà áúáèðááòñý ÷áòúðúì ý èèáàèøàì è éóðñí ðà
è:+, -. Éí í ðáèí àòú óáí òðà ì ðí áèòèè (í òì áòèà èç éí ðí ðí é áú
í ááèþáááòá) í òí áðáæáþòñý á èááí ì ááðòí áì óàèá ýèðáí á.

Éí ì áí áà 'P' - í òí áðáæááì í á èçí áðáæáí èá é Postscript Óàééó.

Ñí ááðæáí èá :

chemstr.exe Í àñòí ýúàý áúí í éí ýáì àý í ðí áðàì ì á ñ
í àðí èáì :1234567890.

 í ò÷áòá í í òáì á:"Óèì è÷áñèèé àèçàéí èàé óí ðí à
éí ì í üþòáðí í áí

 ì í ááèèðí ááí èý ñáí éñòà ì àòáðèàéí á".

 Si3N4.str Óàéé éðèñàèèè÷áñèí é ñòðóéòóðú í èòðèáá éðáì í èý ñí
ñí áöèàèüí í -

 í ðèáí òèðí ááí í í é ñòðóéòóðí é á 3-ò ì áðí í ì í ðí ñòðáí ñàáá.

 Óàéé çáááí í í áí ñí ñòàáá áúáí áèò í à ì í í èòí ð óááòí í á òðáòí áðí í á
èçí áðáæáí èá ì ðí áèòèðóáì í áí ì àòáðèàèá "ñèòðáí ".

ĀŪĀĪ ĀŪ

1.Ī nōūānoāēāī āī āēēç nōūānōāōpūāé èèòāðāòóðū īī ðaçðāāàòūāāāī īé òāī ā ā òīī ÷ēñēā n ēñīīēūçīāāī ēāī e-mail è ftp-nāðāāðī ā.

2.ðaçðāāī òāī ū è ī ðī ēēēpñòðēðī āāī ū āī çī īæī īnòè ðāñ÷òāā òēçè÷āñēèò nāī ēñòā nī ēāāī ā ðaçèè÷ī ī āī nī nòāāā nī īī ī ū ūp ī ðī āðāī ī ū UCMO(ōī ēāāðnāēūī āy ēī ī ī ū-pōāðī āy ī ī āāēū ā ī ī āðāōēyō).

3.Ī āī āðōāēāī ā òēçēēī-òēī è÷āñēāy çāēīīīī āðī īnòū ī āæāó āāēè÷ēī āī è yī āðāēè àðī ī èçāōēè nī āāēī āī ēy è òī ðī ī é òēī è÷āñēī ē nāyçè ā nī āāēī āī èè, nī ēāāā.

4.Āī āðāūā òñōāī īāēāī ā çāēñēī īnòū ī āæāó òī ðī ī é ī āæāōī ī ī āī āçāēī ī āāēñōāēy, āāēè÷ēī ī é āī òðāī ī āāī òðāī ēy ī āæāó àðī ī āī è āāūānōāā è āāēè÷ēī ī é ēī yōōēōēāī òā òðāī ēy ā òīī ÷ēñēā āēy ī āī āðāēēè÷āñēèò ī āðāðēāēī ā.

5.Ī īnòðī āī ēī òāāðēðī āāī ī ū é ī āēāò Nhem.Office, ī ī çāī ēy pū èè ī ðī āēòēðī āàòū ī ā ī ēī nēī nōè, ā çàðāī è ā òðāōī āðī īī èçī āðāāēāī èè ī āðāðēāēū çāāāī ī ī āī ī ī ēāēōēyðī ī āī nī nòāāā, ā çàðāī ī ðāānōāāēòū ī ðēāī òēðī āāī ī ū é ī āðāðēāē çāāāī ī ī āī ī āī āðāēēè÷āñēī āī ā òī ðī ā ēðēñòāēēè÷āñēī é nòðōēòóðū n çāāāī ī ī é nòāī āī ūp nēī ī āððēè.Ī āðī èè òðāō ī ðī āðāī ī :chem1.exe;chemv.exe;chemstr.exe nī nòāāēyāò ÷ēñēī :123456789.

6.Ā ēā÷ānōāā ī āī āðāēēè÷āñēī āī ī āðāðēāēā,ðāēī ī āī āōāī ī āī āēy ēñī īēūçī āāī ēy ā òī ðī ā ēī ēī āī é èèè āēñēī ā òī ðī īæāī ēy òī ðī ī çī ūò òñòðī ēñòā ēī ēāñā, ī ðāāēāāāāðñy ī ðēāī òēðī āāī ī ū é nī nòāā nēòðāī ā yēāēāēāī òī ī āī ī ī nī nòāāó ī èòðēāó ēðāī ī ēy Si₃N₄.

ĒÈÒĀÐĀÒÓÐĀ

1.Ī ī āōī ī ðū āēy ēī nī ī nā(nī ðāāī ÷ī èè).Ī .:Ī āðōēēòðāēy,1967.-266Ñ.

2.Ā.Ā.Ñāī nī ī ī ā,Ē.Ī .Āēī èòēēē.Óōāī ī ēāāēēā nī āāēī āī ēy.Ī .:Ī āðāēēòðāēy,1976.-568Ñ.

3.Ā.Òāēāī ð.Òðāī ēā è nī āçēā.Ī .:Ī āøēī īnòðī āī ēā,1960.-476Ñ.

4.Ē.Ē.Ēī ðī èēī ā Æēāēāçī ūā nī ēāāū.ò.1-3,Ī .:ĒĪ ī Ō èī .Ī .Ñ.Ēóðī āēī āā,Ī .-Ē.:1945-56.

5.Ī .Ī .Ī āðpøāī ēī .Ēðēñòāēēè÷āñēēā nòðōēòóðū āāī ēī ūò nī āāēī āī èè. Ī .:Ī āðāē-ēòðāēy,1969.-302Ñ.

6.Āòāī ī ā Yēñī āðēī āī òāēūī ūā ī nī ī āū nòðōēòóðī ī é òēī èè. Ī .:Ēçāāòāēūñōāī nòāī āāðōī ā,1986.-239Ñ.

7.Ñ.Ñ.Āòāī ī ā Yēāēòðī ī òðēòāòāēūī īnòū yēāī āī òī āū è òēī è÷āñēāy nāyçū.Ī ī āī nē-āēðñē:ÑĪ ĀĪ ÑÑÑÐ,1962.-196Ñ.

8.Ñ.Ñ.Āāòāī ī ā Ñòðōēòóðī āy ðāòðāēòī ī āððēy.Ī .:ĀØ,1976.-304Ñ.

9.Ā.Ā.Āī ÷āàð.Ī āðāēēī āāāī ēā.Ī .:ĀØ,1956.-405Ñ.