**Научитель, Владимир Витальевич.
Схема атом-атом потенциалов и устойчивость кристаллических структур : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.15. - Пущино, 1984. - 143 с. : ил.больше**

[**Цитаты из текста:**](https://search.rsl.ru/ru/search)

* **стр. 1**

**//; /^с. .^ ^^л/^ '^ / кЩЩШЯ Н А Ш СССР ИНСТИТУТ БИОЛОГИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ На правах рукописи НАУЧИТЕЛЬ ВЛАДИМИР ВИТАЛЬЕВИЧ УДК 548.af54I.57 СХЕМА АТОМ-АТОМ ПОТЕНЦИАЛОВ И УСТОЙЧИВОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР 01.04\*15 - молекулярная физика Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических**

* **стр. 99**

**спектров oi и У фаз с по­ мощью анизотропного атом-атом потенциала. Анизотропия вводилась только для отталкивания. Этот потенциал оказался лучше чем изо­ тропный атом-атом потенциал, т.к. позволил получить устойчивую о фазу, но он оказался недостаточным для предсказания парамет­ ров фазового перехода и для**

* **стр. 130**

**форгду потенциальной поверхности, - 130 характеризующей взаимодействие молекул, и наглядно выявляет связь между кристаллической структурой и характером межмолеку­ лярного взаимодействия. 4. Схема атом-атом БК потенциалов позволила впервые теорети­ чески получить устойчивость кристаллических структур двухатом­**

**Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Научитель, Владимир Витальевич**

**ВВЕДЕНИЕ.**

**1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.**

**2. СТРУКТУРА И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАЛЫХ ЛЕННАРД-ДШНСОВЫХ КЛАСТЕРОВ.**

**2.1. Метод исследования.**

**2.2. Результаты. Кластер из 55 частиц**

**2.3. Кластеры из 13 и 19 частиц.**

**3. РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК БЕНЗОЛА.**

**3.1. Метод.**

**3.2. Результаты.**

**4. МОДЕЛЬ АНИЗОТРОПНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЯЗЕЙ.**

**4.1. Схема связь-связь базисных конфигураций.**

**4.2. Димеры молекул • .\* • ^**

**4.3. Относительная устойчивость разных кристаллических структур, образованных из молекул Н2.**

**4.4. Модельная система.**

**5. АНИЗОТРОПНОЕ АТОМ-АТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ Ыл И СО.**

**5.1. Определение параметров потенциала А/---А/ взаимодействия.**

**5.2. Димеры молекул NA , СО и кристалл СО.**

**6. АНИЗОТРОПНОЕ АТОМ-АТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И УСТОЙЧИВОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ГАЛОГЕНОВ . IOI**

**6.1. Кулоновское взаимодействие между молекулами**

**6.2. Определение параметров характеризующих взаимодействие молекул галогенов**

**6.3. Димеры**

**7. АНАЛИЗ ШДА МШЮЛЕКУЛЯРНОГО ПОТЕНЦИАЛА,**

**ВЫРАЖЕННОГО ПО СХЕМЕ БК ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ.**

**ВЫВОДЫ**