**Иванов, Юрий Петрович.**

## Ячеечная модель в расчетах термодинамических свойств органических кристаллов : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.04. - Москва, 1983. - 197 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Иванов, Юрий Петрович

ВВЕДЕНИЕ.

1. МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РАСЧЕТУ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ.

1.1. Термодинамические модели, основанные на гармоническом приближении.

1.2. Ячеечная модель.

1.3. Метод атом-атомных потенциалов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ.

2.1. Выбор объектов исследования.

2.2. Определение параметров теплового расширения.

2.2.1. Методика эксперимента.

2.2.2. Расчет тензора теплового расширения.

2.2.3. Результаты измерения параметров теплового расширения.

2.3. Измерение теплоемкости.

2.3.1. Аппаратура и методика измерения теплоемкости.

2.3.2. Теплоемкость и термодинамические свойства

1,3,5-трихлорбензола.

2.3.3. Теплоемкость и термодинамические свойства 1,2,4,5-тетрахлорбензола.

3. МЕТОДИКА РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ.

3.1. Расчетные формулы.

3.2. Случай кристаллов с симметрически независимыми молекулами.

3.3. Оценка шестикратных интегралов.

3.4. Вычисление решеточной энергии.

3.5. Процедура расчета термодинамических функций и краткое описание программы.

3.6. Определение экспериментальных значений решеточных составляющих термодинамических функций.

4. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИ ЯМ-ААП ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНА

ЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ.

4.1. Ароматические углеводороды.

4.2. Молекулы с вращающимися метильными группами.

4.3. Хлорзамещенные бензола.

4.4. Гексафторбензол и гексаметклентетрамин.

5. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ.