**Рыльцев, Роман Евгеньевич.**

**Эффективные взаимодействия, структура и фазовые превращения в молекулярных, металлических и наночастичных системах : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.07 / Рыльцев Роман Евгеньевич; [Место защиты: Ин-т физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина]. - Екатеринбург, 2019. - 343 с. : ил.**

**Оглавление диссертациидоктор наук Рыльцев Роман Евгеньевич**

**1.2.1 Термодинамические модели**

**1.2.2 Статистические модели**

**1.3 Универсальные особенности поведения молекулярных, металлических и наночаетичных систем**

**1.3.1 Эффективные потенциалы для молекулярных, металлических и наночаетичных систем**

**1.3.2 Фазовые превращения в атомарных и наночаетичных системах , ,**

**2 Статистическая термодинамика сетеобразующих систем**

**2.1 Введение**

**2.2 Формулировка статистической модели [1,2]**

**2.3 Приближение среднего поля [1-3]**

**2.4 Равновесие жидкость-пар в наночаетичных сетеобразующих системах [4]**

**2.5 Расслоение в бинарном растворе с химическим взаимодействием [3,5] , ,**

**2.6 Переходы золь-гель в сетеобразующих системах [2,3]**

**2.6.1 Постановка задачи**

**2.6.2 Фазовая диаграмма и структурные характеристики: случай постоянной реакционной способности**

**2.6.3 Пространственные корреляции и перколяционный переход , , , ,**

**2.6.4 Случай переменной реакционной способности частиц**

**2.6.5 Приложение: расчет корреляционной функции**

**2,7 Термодинамические и структурные свойства бинарного ассоциированного**

**раствора с химическим взаимодействием**

**2.7.1 Постановка задачи**

**2.7.2 Термодинамический потенциал и уравнения равновесия [6-8] , , ,**

**2.7.3 Применение к системам А1-РЗМ [6,8-10]**

**2.7.4 Сравнение с моделью идеального ассоциированного раствора [11,12] 117 2,8 Выводы к главе**

**3 Структура и динамика систем с мультимасштабными взаимодействиями**

**3.1 Введение**

**3.2 Стеклование в двухмаештабных системах [13]**

**3.2.1 Постановка задачи**

**3.2.2 Методы**

**3.2.3 Результаты**

**3.3 Образование декагональных квазикристаллов [14]**

**3.3.1 Постановка задачи**

**3.3.2 Методы**

**3.3.3 Эффективные параметры**

**3.3.4 Структура твердых фаз в ESS модели**

**3.3.5 Критерий формирования декагонального порядка**

**3.3.6 Выводы**

**3.4 Образование додекагональных квазикристаллов [15]**

**3.4.1 Постановка задачи**

**3.4.2 Методы**

**3.4.3 Эффективные параметры**

**3.4.4 Универсальность образования додекагональных квазикристаллов**

**3.4.5 Выводы**

**3.5 Структуры золотого сечения и икосаэдрический квазикристалл**

**3.5.1 Постановка задачи**

**3.5.2 Результаты**

**3.6 Кристаллизация в двухмаештабных системах**

**3.7 Универсальная фазовая диаграмма**

**3.8 Выводы к главе**

**4 Структура и динамика аморфизующихся металлических сплавов**

**4.1 Введение**

**4.2 Кристаллизационная стабильность модельных сплавов С 'п-Хг-( А1) [16,17]**

**4.2.1 Постановка задачи**

**4.2.2 Методы**

**4.2.3 Эволюция структуры при непрерывном охлаждении**

**4.2.4 Эволюция структуры при изотермическом отжиге**

**4.2.5 Влияние размера системы на процесс кристаллизации**

**4.2.6 Выводы и дискуссия**

**4.3 Ближний порядок и етеклообразующая способность сплавов ('и-Хг [18] ,**

**4.3.1 Постановка задачи**

**4.3.2 Методы**

**4.3.3 Результаты**

**4.3.4 Выводы**

**4.4 Ближний порядок и етеклообразующая способность сплавов \i-Xr [19]**

**4.4.1 Постановка задачи**

**4.4.2 Методы**

**4.4.3 Результаты**

**4.4.4 Дискуссия**

**4.4.5 Выводы**

**4.5 Выводы к главе**

**5 Структура и динамика сверхкритических флюидов**

**5.1 Введение**

**5.2 Эволюция ближнего порядка в однокомпонентных флюидах [20]**

**5.2.1 Постановка задачи**

**5.2.2 Методы**

**5.2.3 Структура ближнего порядка**

**5.2.4 Характерные временные масштабы**

**5.2.5 Сравнение с моделью мягких сфер**

**5.2.6 Вириальные разложения и вклад тетраэдров в термодинамику**

**5.2.7 Перколяция ближнего порядка**

**5.2.8 Выводы и дискуссия**

**5.3 Гидродинамические аномалии в сверхкритических флюидах [21]**

**5.3.1 Постановка задачи**

**5.3.2 Детали моделирования**

**5.3.3 Долговременное поведение АКФС**

**5.3.4 Поведение АКФС на промежуточных масштабах**

**5.3.5 Стабильность гидродинамических аномалий**

**5.3.6 Природа гидродинамических аномалий**

**5.3.7 Выводы**

**5.4 Комплексные сингулярности АКФС флюидов [22-24]**

**5.4.1 Постановка задачи**

**5.4.2 Методы**

**5.4.3 Результаты**

**5.4.4 Выводы**

**5.5 Выводы к главе**

**Заключение**

**Введение**