**Абгарян, Каринэ Карленовна.**

## Алгоритмы определения устойчивых кристаллических структур для заданной химической формулы : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.01.09. - Москва, 1999. - 101 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Абгарян, Каринэ Карленовна

Введение

Глава 1. Методы решения задачи поиска всех кристаллических структур для заданной химической формулы.

П.1.1. Постановка задачи поиска всех кристаллических структур для заданной химической формулы. Основные понятия и определения. 13 П.1.2. Алгоритм определения всех топологических типов кристаллических структур для любой заданной формулы на примере семейства перовскитов.

П. 1.3. Постановка оптимизационной задачи определения метрических параметров кристаллических структур в общем случае. 24 П.1.4. Постановка оптимизационной задачи определения устойчивых кристаллических структур в рамках модели ионно-атомных радиусов.

П.1.5. Применение вычислительных алгоритмов для решения оптимизационной задачи поиска устойчивых кристаллических структур.

Глава 2. Алгоритмы поиска устойчивых кристаллических структур для заданной химической формулы

П.2.1. Основные понятия и определения используемые при математической постановке оптимизационных задач

П.2.2. Математическая постановка оптимизационных задач для системы ионных и системы атомных радиусов, а также оптимизационной задачи для модели с перекрывающимися радиусами

П.2.3.Общий подход к построению системы алгоритмов.

П.2.4. Алгоритм локального поиска устойчивых кристаллических структур.

П.2.5. Модифицированный метод отжига поиска устойчивых кристаллических структур.

П.2.6. Вычислительные алгоритмы для модели шаров с перекрывающимися радиусами.

Глава 3. Применение разработанных алгоритмов для решение задачи поиска новых устойчивых кристаллических структур.

П.3.1. Аналитический способ определения устойчивых кристаллических структур, принадлежащих кубической симметрии на примере семейства перовскитов ( химическая формула АВСг, группа РтЗт).

П.3.2. Прогнозирование возможных устойчивых структур, по заданной химической формуле, на примере семейства перовскитов (АВС3,РтЗт).

П.3.3. Прогнозирование возможных устойчивых структур, на примере семейства перовскитов со структурой эльпасолита-формула АгВУОг Р.\*- группа симметрии РтЗт и шпинелей - формула АВ2С4, группа симметрии Рс!3т.

П.3.4. Применение разработанных подходов при исследовании на устойчивость кристаллических структур металлов и их оксидов.

П.3.5. Вычисление свойств устойчивых кристаллических структур

П.3.6. Вычислительные схемы разработанных алгоритмов.