**Квашнин, Александр Геннадьевич.  
Компьютерный дизайн новых функциональных и конструкционных материалов с заданными физико-химическими свойствами для целенаправленного синтеза : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.07 / Квашнин Александр Геннадьевич; [Место защиты: ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»]. - Москва, 2020. - 411 с. : ил.**

**Оглавление диссертациидоктор наук Квашнин Александр Геннадьевич**

**ГЛОССАРИЙ**

**ВВЕДЕНИЕ**

**ГЛАВА 1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ СВЕРХТВЁРДЫХ И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ МАТЕРИАЛОВ**

**1.1. Сверхтвёрдые неуглеродные материалы**

**1.1.1. Бориды и карбиды хрома**

**1.1.2. Сложности определения кристаллической структуры**

**1.1.3. Бориды вольфрама**

**1.1.4. Бориды молибдена**

**1.1.5. Бориды гафния и циркония**

**1.2. Сверхпроводящие материалы**

**1.2.1. Купраты**

**1.2.2. Металлический водород и гидрид серы**

**1.2.3. Гидриды лантана**

**1.2.4. Гидриды урана**

**1.2.5. Гидриды тория**

**1.2.6. Гидриды железа**

**1.2.7. Другие сверхпроводящих гидриды**

**ГЛАВА 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДЫ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В РАБОТЕ**

**2.1. Теория функционала электронной плотности**

**2.1.1. Введение**

**2.1.2. Теория Хоэнберга-Кона**

**2.1.3. Самосогласованные уравнение Кона-Шэма**

**2.1.4. Приближение локальной электронной плотности (ЮЛ)**

**2.1.5. Обобщённое градиентное приближение (ввЛ)**

**2.2. Теория возмущения функционала электронной плотности**

**2.2.1. Методика расчёта фононного спектра твёрдого тела**

**2.3. Методы расчёта сверхпроводящих свойств материалов**

**2.3.1. Многочастичная теория Мигдала-Элиашберга**

**2.3.2. Уравнения Элиашберга**

**2.3.3. Численное решение уравнений Элиашберга**

**2.3.4. Расчёт других характеристик сверхпроводящего состояния**

**2.3.5. Формулы Аллена-Дайнса и МакМиллана**

**2.4. Эволюционный алгоритм предсказания кристаллических структур USPEX**

**2.4.1. Оператор наследственности**

**2.4.2. Оператор мутации кристаллической решётки**

**2.4.3. Оператор мутации мягких мод**

**2.4.4. Оператор перестановки**

**2.4.5. Функция «отпечатка пальца» (fingerprint)**

**2.5. Расчёт твёрдости материалов**

**2.5.1. Модель Чена**

**2.5.2. Модель Ляхова-Оганова**

**2.5.3. Модель Гао**

**2.5.4. Модель Симунека**

**2.5.5. Модель Мажника-Оганова**

**2.5.6. Сравнение моделей твёрдости**

**2.6. Расчёт трещиностойкости кристаллов**

**2.6.1. Модель Ниу-Оганова**

**2.6.2. Модель Мажника-Оганова**

**2.7. Расчёт упругих постоянных и их температурных зависимостей**

**2.8. Расчёт фазовых диаграмм**

**ГЛАВА 3. СВЕРХТВЁРДЫЙ ВЫСШИЙ БОРИД ВОЛЬФРАМА**

**3.1. Компьютерный поиск стабильных W-B соединений и сравнение с экспериментом**

**3.1.1. Кристаллическая структура и стабильность предсказанных соединений боридов вольфрама**

**3.1.2. Механические характеристики предсказанных боридов вольфрама**

**3.1.3. Температурная стабильность предсказанных соединений**

**3.1.4. Температурная зависимость механических свойств**

**3.2. Фазовые переходы в моноборидах вольфрама**

**3.2.1. Кристаллическая структура**

**3.2.2. Термодинамическая стабильность**

**3.2.3. Структурные фазовые переходы**

**3.3. Экспериментальный синтез сверхтвёрдого высшего борида вольфрама**

**3.3.1. Синтез образцов**

**3.3.2. Расшифровка кристаллической структуры и теоретические модели синтезированного материала**

**3.3.3. Термодинамическая стабильность предложенных структурных моделей**

**3.3.4. Решёточная модель для описания структуры WB5-X**

**3.3.5. Исследование температурной стабильности предложенных моделей WB5-X**

**3.3.6. Измерение механических свойств синтезированных материалов**

**3.4. Экспериментальные методы**

**3.5. Детали численного расчёта**

**3.6. Выводы**

**ГЛАВА 4. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОИСК НОВЫХ СВЕРХТВЁРДЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ**

**4.1. Предсказание сверхтвёрдых боридов и карбидов хрома**

**4.1.1. Кристаллическая структура и стабильность соединений Cr-B и Cr-C**

**4.1.2. Механические свойства карбидов и боридов хрома**

**4.2. Предсказание стабильных нитридов хрома и исследование их физических свойств**

**4.2.1. Эволюционный поиск стабильных соединений**

**4.2.2. Динамическая стабильность и фазовые диаграммы нитридов хрома**

**4.2.3. Механические свойства нитридов хрома**

**4.2.4. Выбор параметров расчёта для системы Cr-N**

**4.3. Предсказание новых сверхтвёрдых боридов молибдена**

**4.3.1. Стабильность и кристаллическая структура боридов молибдена**

**4.3.2. Механические свойства**

**4.3.3. Особенности кристаллической структуры и термодинамической стабильности высших боридов молибдена**

**4.3.4. Решёточная модель для построения структуры высшего борида молибдена**

**4.3.5. Стабильность структур с промежуточным составом**

**4.3.6. Сравнение смоделированных дифрактограмм с экспериментом**

**4.4. Комплексное исследование структуры и механических свойств новых боридов гафния**

**4.4.1. Стабильность боридов гафния при 0 K**

**4.4.2. Высокотемпературная стабильность боридов гафния**

**4.4.3. Структурные мотивы борной подрешётки в предсказанных соединениях**

**4.4.4. Механические свойства боридов гафния**

**4.4.5. Являются ли бориды гафния сверхтвёрдыми?**

**4.5. Методы расчёта**

**4.6. Обсуждение и выводы**

**ГЛАВА 5. СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ ГИДРИДЫ УРАНА И ТОРИЯ: КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОИСК И СИНТЕЗ**

**5.1. Компьютерный поиск и последующий синтез гидридов урана под давлением**

**5.1.1. Стабильность и кристаллическая структура**

**5.1.2. Результаты экспериментального синтеза гидридов урана**

**5.1.3. Расчёт электронных и сверхпроводящих свойств**

**5.2. Теоретическое предсказание сверхпроводящих гидридов тория**

**5.2.1. Компьютерный поиск и термодинамическая стабильность**

**5.2.2. Динамическая стабильность и электронные свойства**

**5.2.3. Сверхпроводящие характеристики гидридов тория**

**5.2.4. Зависимость от давления**

**5.3. Экспериментальный синтез высших гидридов тория**

**5.3.1. Детали эксперимента**

**5.3.2. Синтез и определение кристаллической структуры тетрагидрида тория**

**5.3.3. Синтез и кристаллическая структура Р6э/ттс-ТЬН9**

**5.3.4. Стабильность и физические свойства Р6э/ттс-ТЬН9**

**5.3.5. Синтез гексагидрида тория**

**5.3.6. Синтез ТЪНю**

**5.3.7. Измерение сверхпроводящих свойств ТИН9 и ТЬНю**

**5.3.8. Уравнения состояния синтезированных полигидридов тория**

**5.3.9. Обсуждение**

**5.4. Методы расчёта**

**5.5. Выводы к главе**

**ГЛАВА 6. ВЫСШИЕ ГИДРИДЫ ЖЕЛЕЗА, АКТИНИЯ И ЛАНТАНА: КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОИСК**

**6.1. Предсказание гидридов железа и исследование их физических свойств**

**6.1.1. Эволюционный поиск термодинамически стабильных соединений в системе Гв-Н**

**6.1.2. Электронные свойства**

**6.2. Сверхпроводящие гидриды актиния**

**6.2.1. Предсказание кристаллических структур гидридов актиния и их стабильность**

**6.2.2. Электронные и сверхпроводящие свойства**

**6.3. Сверхпроводящие гидриды лантана под давлением**

**6.3.1. Стабильность гидридов лантана**

**6.3.2. Сверхпроводящие свойства полиморфных модификаций 1аНю**

**6.3.3. Структура и свойства нового высшего гидрида Р6/ттт-ЬаН1в**

**6.3.4. Другие сверхпроводящие высшие гидриды лантана**

**6.4. Методы расчёта**

**6.5. Выводы к главе**

**ГЛАВА 7. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ ГИДРИДОВ ПО ПСХЭ**

**7.1. Период 4. K-Ca-Sc-Ti-V-Cr**

**7.2. Период 5. Rb-Sr-Y-Zr-Nb-Mo-Tc**

**7.3. Период 6. Cs-Ba-La-Hf-Ta**

**7.4. Лантаноиды и актиноиды**

**7.5. Обсуждение и выводы**

**ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ**

**БЛАГОДАРНОСТИ**

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

**ПРИЛОЖЕНИЕ**

**Соединения W-B. Кристаллическая структура**

**Соединения Mo-B. Кристаллическая структура**

**Соединения Hf-B. Кристаллическая структура, стабильность, механические свойства**

**Соединения Fe-H. Кристаллическая структура**

**Соединения U-H. Кристаллическая структура, стабильность и электронные свойства**

**Соединения Ac-H. Кристаллическая структура, стабильность и электронные свойства**

**Соединения La-H. Кристаллическая структура, стабильность, сверхпроводящие свойства**

**Соединения Th-H. Кристаллическая структура и сверхпроводящие свойства**

**Соединения Th-H. Дополнительные экспериментальные данные**

**Распределение сверхпроводящих свойств по ПСХЭ. Дополнительные данные**

**Библиография**