**Таланов, Михаил Валерьевич.
Структурные механизмы фазовых переходов и макроскопические отклики многоподрешеточных кристаллов с различным проявлением атомного порядка : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.18 / Таланов Михаил Валерьевич; [Место защиты: Южный федеральный университет]. - Ростов-на-Дону, 2020. - 504 с. : ил.больше**

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

* **стр. 1**

**УНИВЕРСИТЕТ» На правах рукописи ТАЛАНОВ Михаил Валерьевич СТРУКТУРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ И МАКРОСКОПИЧЕСКИЕ ОТКЛИКИ МНОГОПОДРЕШЕТОЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ С РАЗЛИЧНЫМ ПРОЯВЛЕНИЕМ АТОМНОГО ПОРЯДКА Специальность 01.04.18 – кристаллография, физика кристаллов 01.04.07 – физика конденсированного состояния**

* **стр. 7**

**решению научно-технической проблемы установления комплексных структурных механизмов и роли различных структурных степеней свободы при формировании низкосимметричных фаз многоподрешеточных кристаллов с различным проявлением атомного порядка в функциональных материалах, востребованных для практических применений.**

* **стр. 10**

**механизмов формирования низкосимметричных упорядоченных фаз кристаллов с геометрически фрустрированными подрешетками. Цель работы: установление структурных механизмов формирования упорядоченных фаз перовскитов, пирохлоров и шпинелей, а также выявление общих закономерностей макроскопических откликов в релаксорных (стекольных) системах с различным проявлением атомного порядка. Для достижения поставленной цели необходимо решить...**

**Оглавление диссертациидоктор наук Таланов Михаил Валерьевич**

**Введение**

**1 Атомный порядок в фрустрированных системах (аналитический литературный обзор)**

**1.1 Концепция фрустрации и основные её типы**

**1.2 Типы структур с геометрической фрустрацией**

**1.3 Шпинели как геометрически фрустрированные системы**

**1.3.1 Тетрагональная фаза MgTi2O4**

**1.3.2 Ромбоэдрическая фаза AlV2O4**

**1.3.3 Ромбоэдрические тиошпинели СиЛ^4 и CuZr1.86S4**

**1.3.4 Иридиевые шпинелеподобные соединения с атомным порядком**

**гипер-кагоме**

**1.4 Сегнетоэлектрики-релаксоры как фрустрированные неупорядоченные системы**

**1.5 Гигантские пьезоэлектрические отклики твердых растворов с участием сегнетоэлектриков-релаксоров**

**1.6 Диэлектрическая релаксация в висмут-содержащих пирохлорах**

**1.7 Упорядоченные перовскиты**

**1.8 Обобщающие выводы из литературного обзора**

**2 Методы теоретического и экспериментального исследования**

**2.1 Теоретико-групповой анализ упорядоченных фаз**

**2.2 Объекты эксперимента: четырехкомпонентная и трехкомпонентная системы твердых растворов**

**2.3 Методы изготовления и обработки экспериментальных образцов**

**2.4 Методы определения кристаллической структуры и плотности образцов**

**2.5 Методы измерения параметров макроскопических (диэлектрических,**

**электромеханических) откликов и их зависимостей от внешних воздействий**

**3 Атомное упорядочение в структуре перовскита**

**3.1 Классификация аристотипов катионного и анионного порядков**

**3.2 Упорядочение атомов в А- и 5-подрешетках структуры перовскита**

**3.3 Комбинированное упорядочение атомов в А- и в 5-подрешетках структуры перовскита**

**3.4 Упорядочение анионов в структуре перовскита**

**3.4.1 Простейшие аристотипы анионного порядка: АХ-класс**

**3.4.2 Простейшие аристотипы анионного порядка: ВХ-класс**

**3.4.3 Простейшие аристотипы анионного порядка: Х-класс**

**3.5 Упорядочение 1:3 в А-подрешетке структуры перовскита**

**3.6 Структурные предпосылки для проявления геометрической фрустрации в упорядоченных перовскитах**

**3.7 Упорядочение катионов и анионов в структуре перовскита как источник несобственной поляризации**

**4 Релаксорные свойства в системах с различным проявлением атомного беспорядка**

**4.1 Перовскиты с композиционным беспорядком в системе (РЬ1-2Ба2)(7п1/3КЪ2/3)у(Мв1/3КЪ2/3)т(Н11/3КЪ2/3)пТ1х03**

**4.2 Перовскиты с композиционным беспорядком в системе РЬТЮ3-РЬМв1/3ЫЬ2/303- Б18е03**

**4.3 Возможные типы упорядоченных кластеров в сегнетоэлектриках-релаксорах на основе Pb(Mg1/зNb2/з)0з**

**4.4 Структура и диэлектрические отклики геометрически фрустрированного кристалла Б12Т1207**

**4.5 Возможные типы сегнетоэлектриков и сегнетоэластиков с пирохлороподобной структурой**

**5 Структурные механизмы фазовых переходов в кристаллах с геометрически фрустрированными пирохлорными подрешетками**

**5.1 Универсальный механизм формирования тетраэдрических металлических кластеров в структурах с дышащей пирохлорной подрешеткой**

**5.2 Структурный механизм фазового перехода в М£Л204**

**5.3 Ванадиевые кластеры в шпинели Л1^04**

**5.4 Новый тип металлических кластеров в СиЛ^4**

**5.5 Два механизма образования металлических кластеров в структурах ромбоэдрически искаженных шпинелей: Л1У204 и Си2г186(1^4**

**5.6 Атомный порядок гипер-кагоме в геометрически фрустрированных**

**структурах**

**Заключение**

**Список литературы**

**Список публикаций автора**

**Приложение 1. Определение диэлектрических параметров образцов системы**

**РиЛОв-РЬМ^^^- :^с03**

**Приложение 2. Использование уравнения Аррениуса для описания**

**диэлектрической релаксации в монокристалле Б12Т1207**

**Приложение 3. Фазы несобственных сегнетоэлектриков, получаемых из**

**кубического пирохлора**

**Приложение 4. Базисные функции НП к11т4 пр.гр. т**

**Приложение 5. Декомпозиция атомных смещений на вклады от собственных и несобственных параметров порядка при фазовом переходе т ^ ЕА3т в**

**Ce2Zr2O7+a и NH4NЪWO6**

**Приложение 6. Смещения атомов на исходной позиции 48/пр. гр. ^3т при переходе в фазу с пр.гр. РА3т**

**Приложение 7. Список фаз, индуцированных НП к10т2 пр. гр. ^йЗт**

**Приложение 8. Список фаз, индуцированных НП к9т4 пр. гр. FdЗт**

**Приложение 9. Взаимосвязь структур фаз с пр. гр. т и Я3т**

**Приложение 10. Теоретический вывод структуры Я3т -фазы**

**Приложение 11. Межатомные расстояния в ванадатах со структурой шпинели**