**Татаринская, Ольга Михайловна.**

## Теоретическое изучение стабильности кристаллических структур переходных металлов : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07. - Москва, 1984. - 115 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Татаринская, Ольга Михайловна

ВВЕДЕНИЕ. . •.

ГЛАВА. I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.

§ I. Метод модельного псевдопотенциала и его обобщение на случай переходных металлов.

§ 2. Псевдопотенциал Анималу для переходных металлов.

§ 3. Сравнение результатов расчетов стабильных структур чистых металлов методом псевдопотенциала с экспериментальными данными.

§ 4. Сравнение рассчитанных и измеренных температур полиморфных превращений в металлах.

§ 5. Фононный спектр и неустойчивость решетки в ГПУ металлах.

§ б. Постановка задачи.

ГЛАВА 2. МЕТОДИКА РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ В ТЕОРИИ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА.

§ I. Вычисление полной энергии металлов и сплавов методом псевдопотенциала. Определение стабильной структуры при Т = О К.

§ 2. Расчет фононного вклада в свободную энергию.

ГЛАВА 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИССЛЕДОВАНИЯ СТАБИЛЬНОСТИ СТРУКТУР ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ ПСЕВДОПОТЕН

ЦЙАЛА И ИХ СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ.

§ I. Устойчивые структуры некоторых переходных металлов при Т = О К.

§ 2. Результаты расчета полиморфных превращений при конечных температурах.

§ 3. Расчеты структурных фазовых переходов в бинарных сплавах Со при Т = О К.

ГЛАВА 4. ИЗУЧЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ГПУ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ПРИ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ МЕТОДОМ ОДНОРОДНОЙ

ДЕФОРМАЦИИ.

§ I.Упругая энергия кристалла, тензор структурной деформации и устойчивость ГПУ кристаллической решетки

§ 2.Критерии устойчивости при полиморфном превращении

§ 3.Результаты численного расчета устойчивости решетки в ГПУ переходных металлах.