

Микроскопическая теория структурных фазовых переходов
типа смещения и типа порядок-беспорядок
в некоторых семействах кристаллов
(сообщение о докторской диссертации
к.ф.м.н. Замковой Н.Г. на физическом семинаре ИФ СО РАН)

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДА

1. Расчет полной энергии и динамики решетки ионных кристаллов в микроскопической модели Гордона - Кима. Статические свойства и полные фононные спектры кристаллов со структурой ReO_3 , антиперовскита и эльпасолита.
2. Фазовый переход, индуцированный гид-ростатическим давлением в кристалле ScF_3 .
3. Роль энергии поляризации в стабилизации гексагональных структур в кристаллах RbMnX_3 .
4. Структурный фазовый переход из кубической в тетрагональную фазу в кристаллах со структурой эльпасолита. Модельный гамильтониан и определение его параметров.
5. Вычисление температуры фазового перехода и термодинамических свойств методом Монте - Карло.
6. Расчет эффективных констант взаимодействия тетраэдрических групп BX_4 в кристаллах семейства сульфата калия в электростатической модели.
7. Термодинамика последовательных фазовых переходов.
8. Структура несоизмерной фазы в кристаллах Rb_2ZnCl_4 и K_2SeO_4 . Длинноволновая и коротковолновая модуляция.