

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ – МОЩНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДИЗАЙНА МАТЕРИАЛОВ

Таланов В.М.,^а Таланов М.В.,^б Широков В.Б.^{б,в}

*^аЮжно-Российский государственный политехнический университет
346428 Новочеркасск, Просвещения 132,
e-mail: valtalanov@mail.ru*

*^бНИИ физики Южного федерального университета
344090 Ростов-на-Дону, Стачки 194, ЮФУ*

^вЮжный научный центр РАН 344006 Ростов-на-Дону, Чехова 41

Рассмотрено применение теоретико-групповых, структурных и термодинамических методов современной феноменологической теории фазовых переходов к расчетному проектированию новых материалов, прогнозу новых структурных, магнитных и орбитальных состояний кристаллов, конструированию их строения, интерпретации физических и химических свойств.

Возможности теории проиллюстрированы на примерах материалов со структурами шпинели, перовскита, пироклора. Отмечено, что в рамках теории впервые было предсказано существование так называемых “орбитальных молекул” в твердых телах, уникального атомного порядка гипер-кагоме, новых фаз в сегнетоэлектрических, магнитных, электродных материалах и катализаторах различных химических процессов.

Обсуждаются границы применимости теории к задачам дизайна новых материалов и дальнейшие пути ее развития.

Литература

1. Talanov M.V. Acta Crystallogr. A., 2019, 74, 379.
2. Talanov M.V. Crystal Growth and Design, 2018, 18, 3433.
3. Talanov M.V., Широков V.B., Avakyan L.A., Talanov V.M., Borlakov K.S. Acta Crystallogr. B., 2018, 74, 337.
4. Talanov M.V., Широков V.B., Talanov V.M. Phys. Chem. Chem. Phys., 2016, 18, 10600.
5. Talanov M.V., Широков V.B., Talanov V.M. Acta Crystallogr. A., 2016, 72, 222.
6. Talanov V.M., Широков V.B., Talanov M.V. Acta Crystallogr. A., 2015. T. 71. C. 301-318.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 18-72-00030.