

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ, ФАЗОВЫХ СОСТОЯНИЙ И СВОЙСТВ
НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СИММЕТРИЙНО-
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ЛАНДАУ**

В. М. Таланов

Южно-Российский государственный технический университет

(Новочеркасский политехнический институт)

Проблема научно обоснованного прогноза новых материалов с определенным комплексом необходимых для практического использования физико-химических свойств и, прежде всего, аномальных, – одна из наиболее важных проблем химии.

В основе проводимых автором теоретических исследований лежат два взаимосвязанных положения.

1. Развиваемый подход опирается на мощные симметричные и термодинамические методы теории фазовых переходов второго рода Ландау. Основная особенность этой теории, предопределяющая ее исключительную важность для физической химии твердого тела и материаловедения, состоит в том, что с единых позиций удастся рассмотреть взаимосвязь состава, структуры и свойств вещества.

2. Аномалии физико-химических свойств вещества проявляются вблизи критических элементов (критических точек, линий фазовых переходов второго рода и т.д.) фазовых диаграмм.

Программа исследований реализуется на примере структурного типа шпинели, для которого экспериментально открыто большое число соединений и твердых растворов, проявляющих перспективные для применений свойства, обусловленные изменениями структуры в результате непрерывных и квазинепрерывных фазовых переходов.

В докладе на примере хромитов, ванадитов, ирридитов, титанитов и титанатов переходных металлов со структурой шпинели представлены результаты моделирования атомной, зарядовой и орбитальной структуры кристаллов, фазовых равновесий и свойств.