

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	7
Список основных обозначений . . . . .	11
<b>Глава 1. ТИПЫ ДЕФЕКТОВ И НЕСТЕХИОМЕТРИЯ . . . . .</b>	<b>13</b>
Литература к главе 1 . . . . .	20
<b>Глава 2. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ . . . . .</b>	<b>24</b>
§ 2.1. Точечные и пространственные группы . . . . .	24
§ 2.2. Обратная решетка и волновые векторы . . . . .	36
§ 2.3. Элементы теории дифракции . . . . .	46
Литература к главе 2 . . . . .	57
<b>Глава 3. СИЛЬНО НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ . . . . .</b>	<b>60</b>
§ 3.1. Методы приготовления и степень гомогенности . . . . .	61
§ 3.2. Кристаллическая структура и области гомогенности . . . . .	69
§ 3.3. Химическая связь в нестехиометрических соединениях . . . . .	86
§ 3.4. Границы структурной устойчивости . . . . .	98
§ 3.5. Упорядочение в сильно нестехиометрических карбидах, нитридах и оксидах . . . . .	106
3.5.1 Кристаллические структуры упорядоченных нестехиометрических карбидов (108). 3.5.2 Упорядочение в нестехиометрических карбидах ванадия (115). 3.5.3 Упорядочение в нестехиометрических карбидах ниобия, тантала и вольфрама (124). 3.5.4 Упорядоченные фазы нестехиометрических нитридов и оксидов (133). 3.5.5 Особенности структуры упорядоченной фазы $Ti_5O_5$ (138). 3.5.6 Упорядочение твердых растворов нестехиометрических соединений (165).	
Литература к главе 3 . . . . .	167
<b>Глава 4. БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК . . . . .</b>	<b>183</b>
§ 4.1. Параметры ближнего порядка и двухчастичные корреляции . . . . .	183
§ 4.2. Представление вероятностей многочастичных фигур с учетом корреляций. . . . .	186
§ 4.3. Влияние ближнего порядка на интенсивность диффузного рассеяния . . . . .	204
§ 4.4. Диффузное рассеяние и кластерная модель ближнего порядка замещения. . . . .	208
§ 4.5. Ближний порядок в сильно нестехиометрических соединениях . . . . .	220
4.5.1 ЯМР-исследования ближнего порядка (221). 4.5.2 ЯМР и ближний порядок в нестехиометрическом карбиде ниобия (226). 4.5.3 Диффузное рассеяние	

нейтронов и электронов (234). 4.5.4 Исследование ближнего порядка методом магнитной восприимчивости (240). 4.5.5 Ближний порядок в карбидных твердых растворах (243).	
§ 4.6. Локальные смещения атомов . . . . .	245
4.6.1 Методы определения смещений (246). 4.6.2 Смещения атомов в неупорядоченных карбидах и нитридах (249). 4.6.3 Статические смещения атомов вблизи структурной вакансии (257).	
Литература к главе 4 . . . . .	266
<b>Глава 5. ДАЛЬНИЙ ПОРЯДОК . . . . .</b>	<b>274</b>
§ 5.1. Параметры дальнего порядка . . . . .	274
§ 5.2. Канал перехода беспорядок–порядок . . . . .	279
§ 5.3. Канал перехода и интенсивности дифракционных отражений . . . . .	284
§ 5.4. Функции распределения и дифракция на сверхструктурах сильно нестехиометрических соединений . . . . .	289
5.4.1 Сверхструктуры типа $M_2X$ (289). 5.4.2 Сверхструктуры типа $M_3X_2$ (296).	
5.4.3 Сверхструктуры типа $M_4X_3$ (304). 5.4.4 Сверхструктуры типа $M_6X_5$ (308).	
5.4.5 Сверхструктуры типа $M_8X_7$ (317).	
§ 5.5. Сверхструктуры кубического монооксида титана $TiO_y$ . . . . .	323
5.5.1 Сверхструктура $Ti_5O_5$ (323). 5.5.2 Ромбические сверхструктуры $Ti_3O_2$ и $Ti_2O_3$ (326). 5.5.3 Тетрагональная сверхструктура $Ti_4O_5$ (333).	
§ 5.6. Сверхструктуры никелита лития $Li_{1-x-z}Ni_{1+x}O_2$ . . . . .	334
5.6.1 Ромбоэдрическая сверхструктура $LiNiO_2$ (336). 5.6.2 Моноклинные сверхструктуры $Li_3\Box Ni_4O_8$ и $Li_2\Box Ni_3O_6$ (339).	
§ 5.7. Род фазовых превращений беспорядок–порядок . . . . .	346
§ 5.8. Области допустимых значений параметров дальнего порядка . . . . .	348
Литература к главе 5 . . . . .	352
<b>Глава 6. ВЗАИМОЗАВИСИМОСТЬ БЛИЖНЕГО И ДАЛЬНОГО ПОРЯДКА . . . . .</b>	<b>356</b>
§ 6.1. Соотношение ближнего и дальнего порядка . . . . .	356
§ 6.2. Ближний порядок в сверхструктурах . . . . .	364
Литература к главе 6 . . . . .	377
<b>Глава 7. ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ИСПАРЕНИЕ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ НИТРИДОВ И КАРБИДОВ . . . . .</b>	<b>379</b>
§ 7.1. Испарение нестехиометрических нитридов . . . . .	379
§ 7.2. Нитриды и карбонитриды титана . . . . .	384
§ 7.3. Нитриды и карбонитриды ванадия . . . . .	389
§ 7.4. Нитриды и карбонитриды ниобия . . . . .	394
§ 7.5. Высокотемпературное испарение карбидов . . . . .	401
Литература к главе 7 . . . . .	413

---

Глава 8. <b>ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ БЕСПОРЯДОК–ПОРЯДОК</b> . . . . .	417
§ 8.1. Термодинамика фазовых превращений . . . . .	417
§ 8.2. Феноменологическая теория фазовых превращений . . . . .	421
§ 8.3. Приближение среднего поля . . . . .	426
§ 8.4. Кластерные методы в теории упорядочения . . . . .	436
Литература к главе 8. . . . .	444
Глава 9. <b>МЕТОД ФУНКЦИОНАЛА ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА</b> . . . . .	447
§ 9.1. Основные приближения метода . . . . .	447
§ 9.2. Энергии кластеров . . . . .	455
§ 9.3. Выбор базисной кластерной фигуры . . . . .	461
§ 9.4. Вероятности кластеров и подфигур . . . . .	463
§ 9.5. Условия минимума свободной энергии . . . . .	467
Литература к главе 9 . . . . .	479
Глава 10. <b>РАВНОВЕСНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ</b> . . . . .	481
§ 10.1. Расчет превращений беспорядок–порядок в нестехиометрических соединениях. . . . .	486
§ 10.2. Учет упорядочения соединения $MX_y$ на модельной фазовой диаграмме системы $M-X$ . . . . .	489
§ 10.3. Фазовые диаграммы систем $M-X$ ( $M = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, W; X = C, N$ ) . . . . .	500
10.3.1 Система $Ti-C$ (500).   10.3.2 Система $Zr-C$ (522).   10.3.3 Система $Hf-C$ (523).   10.3.4 Система $V-C$ (528).   10.3.5 Система $Nb-C$ (539).   10.3.6 Система $Ta-C$ (540).   10.3.7 Система $Ti-N$ (544).   10.3.8 Система $W-C$ (548).	
§ 10.4. Фазовые диаграммы псевдобинарных систем . . . . .	562
10.4.1 Оценка взаимной растворимости (562).   10.4.2 Модель субрегулярных растворов (566).   10.4.3 Фазовые диаграммы псевдобинарных карбидных систем (578).   10.4.4 Фазовые равновесия, твердофазный распад и поверхностная сегрегация в тройной системе $Zr-Nb-C$ (581).   10.4.5 Фазовая диаграмма тройной системы $Ti-V-C$ (597).	
§ 10.5. Влияние давления на фазовые равновесия . . . . .	599
10.5.1 Эволюция фазовых диаграмм двойных систем при приложении давления (599).   10.5.2 Структурные вакансии в нестехиометрических соединениях под высоким давлением (606).	
Литература к главе 10 . . . . .	617
Глава 11. <b>ВЛИЯНИЕ НЕСТЕХИОМЕТРИИ И УПОРЯДОЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА СИЛЬНО НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ</b> . . . . .	636
§ 11.1. Период базисной решетки . . . . .	637
§ 11.2. Рентгеновские фотоэлектронные и эмиссионные спектры . . . . .	651
§ 11.3. Электронно-позитронная аннигиляция . . . . .	659

---

11.3.1	Время жизни позитронов в карбидах (664).	11.3.2	Аннигиляция позитронов в структурных вакансиях монооксида титана (672).	11.3.3	Угловая корреляция аннигиляционного излучения в карбидах (681).				
§ 11.4.	Электрокинетические свойства . . . . .	687							
§ 11.5.	Магнитная восприимчивость . . . . .	706							
11.5.1	Магнитная восприимчивость нестехиометрических карбидов и нитридов (708).	11.5.2	Эффекты упорядочения на восприимчивости нестехиометрических карбидов (715).	11.5.3	Влияние нестехиометрии (724).	11.5.4	Ближний и дальний порядок (728).	11.5.5	Магнитная восприимчивость нестехиометрических монооксидов титана и ванадия (734).
§ 11.6.	Сверхпроводимость . . . . .	743							
§ 11.7.	Теплоемкость . . . . .	755							
11.7.1	Суперпозиционная модель теплоемкости (755).	11.7.2	Низкотемпературная теплоемкость (760).	11.7.3	Теплоемкость нестехиометрических карбидов в разных структурных состояниях в интервале температур от 78 до 300 К (761).	11.7.4	Теплоемкость нестехиометрических карбидов при температуре выше 300 К и вблизи точки перехода порядок–беспорядок (778).	11.7.5	Теплоемкость нестехиометрического монооксида титана (784).
§ 11.8.	Микротвердость . . . . .	799							
	Литература к главе 11 . . . . .	818							
	Именной указатель . . . . .	843							
	Предметный указатель . . . . .	846							