

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|---|------------|
| Предисловие | 7 |
| Список основных обозначений | 11 |
| Глава 1. ТИПЫ ДЕФЕКТОВ И НЕСТЕХИОМЕТРИЯ | 13 |
| Литература к главе 1 | 20 |
| Глава 2. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ | 24 |
| § 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 |
| Глава 3. СИЛЬНО НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ | 60 |
| § 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 |
| Глава 4. БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК | 183 |
| § 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 |
| | |
| Глава 5. ДАЛЬНИЙ ПОРЯДОК | 274 |
| § 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 |
| | |
| Глава 6. ВЗАИМОЗАВИСИМОСТЬ БЛИЖНЕГО И ДАЛЬНОГО ПОРЯДКА | 356 |
| § 6.1. Соотношение ближнего и дальнего порядка | 356 |
| § 6.2. Ближний порядок в сверхструктурах | 364 |
| Литература к главе 6 | 377 |
| | |
| Глава 7. ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ИСПАРЕНИЕ НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ НИТРИДОВ И КАРБИДОВ | 379 |
| § 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. ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ БЕСПОРЯДОК–ПОРЯДОК | 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. МЕТОД ФУНКЦИОНАЛА ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА | 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. РАВНОВЕСНЫЕ ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ | 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. ВЛИЯНИЕ НЕСТЕХИОМЕТРИИ И УПОРЯДОЧЕНИЯ НА СВОЙСТВА СИЛЬНО НЕСТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ | 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 | | | | |