

## СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие рецензентов.....	13
От авторов.....	15
Предисловие.....	17
<b>Часть I. Атомарные кристаллы.....</b>	<b>19</b>
1. Водород в титане и цирконии. Фазовые превращения $\alpha$ - $\beta$ - $\gamma$ .....	19
Введение.....	19
Свободная энергия $\alpha$ фазы.....	21
Свободная энергия $\beta$ фазы.....	25
Свободная энергия $\gamma$ фазы.....	28
Анализ и обсуждение результатов расчетов. Фазовая диаграмма.....	31
2. Водород в титане и цирконии. Фазовые превращения $\alpha$ - $\beta$ - $\gamma$ - $\delta$ - $\epsilon$ .....	37
Теория.....	38
Анализ результатов.....	43
Диаграмма состояния.....	51
Литература к параграфам 1 и 2.....	54
3. Водород в междоузлиях трех типов сплава $AB_3$ структуры $L1_2$ .....	57
Введение.....	57
Свободная энергия.....	60
Равновесное распределение атомов водорода.....	62
Растворимость водорода.....	67
Кинетика перераспределения атомов водорода.....	72
Заключение.....	78
Литература к параграфу 3.....	80
4. Водород в сплаве $Nb_3Sn$ структуры $A15$ .....	83
Введение.....	83
Постановка задачи.....	84
Свободная энергия.....	87
Растворимость примеси по методу средних энергий.....	92
Растворимость примеси по методу конфигураций.....	93
Концентрационная зависимость растворимости примеси.....	95
Температурная зависимость растворимости примеси.....	99
Влияние атомного порядка на растворимость примеси.....	101
Заключение.....	104
Литература к параграфу 4.....	106
5. Фазовые переходы $G5 \leftrightarrow DO_{19}$ ( $ГЦК \leftrightarrow ГПУ$ ) в сплавах $A_3BD_x$ , стимулированные примесью внедрения D.....	109
Введение.....	109
Свободные энергии сплава $A_3BD_x$ с ГЦК и ГПУ решетками.....	109
Атомный порядок и равновесная концентрация примеси D.....	113
Фазовый переход $G5 \leftrightarrow DO_{19}$ .....	115
Диаграмма состояния.....	117
Литература к параграфу 5.....	122

6. Лантан-никелевые многокомпонентные системы структуры D2d – перспективные накопители водорода.....	123
Введение.....	123
Постановка задачи.....	124
Термодинамический потенциал. Уравнение равновесия.	
Растворимость водорода.....	126
Обсуждение результатов. Сопоставления с экспериментом.....	131
Изотермы растворимости водорода в фазах постоянного состава.....	132
Изотермы растворимости водорода в трехкомпонентной матрице переменного состава.....	136
Изоплеты растворимости водорода.....	140
Изоплеты растворимости газов в металлах и сплавах произвольной структуры и любого состава.....	144
Заключение.....	149
Литература к параграфу 6.....	150
7. Влияние примеси магния в лантан-никелевых сплавах на растворимость водорода.....	155
Введение.....	155
Постановка задачи. Выбор параметров теории.....	157
Расчет свободных энергий сплавов и концентраций водорода.....	159
1. Сплав $La_{2-x}Mg_xNi_7$ .....	159
2. Сплав $LaNi_5$ .....	163
3. Сплав $La_{1-x}Mg_xNi_3$ .....	166
Обсуждение и интерпретация результатов.....	168
Заключение.....	176
Литература к параграфу 7.....	177
8. Изотермы сорбции водорода в магниевых интерметаллидах $CeMgCo_4$ .....	181
Введение.....	181
Теория. Сопоставление с экспериментом.....	183
Заключение.....	189
Литература к параграфу 8.....	191
9. Водородсорбционные свойства магния и его интерметаллидов структуры $Ca_7Ge$ .....	195
Введение.....	195
Расчет свободных энергий. Уравнения термодинамического равновесия.....	201
1. Кристалл $Mg_7TiH_x$ .....	206
2. Кристалл $Mg_6TiAlH_x$ .....	207
3. Кристаллы $Mg_6VH_x$ , $Mg_6TiH_x$ .....	208
4. Кристалл $MgH_x$ .....	208
5. Кристаллы $VH_x$ , $TiH_x$ , $NbH_x$ .....	209
Обсуждение результатов расчетов.....	209
Расчет концентрации и температуры выхода водорода.....	210

Построение изоплет растворимости водорода.....	212
Построение изотерм растворимости водорода.....	213
Заключение.....	213
Литература к параграфу 9.....	215
10. Формирование структурных вакансий в гидриде палладия.....	219
Введение.....	219
Свободные энергии фаз.....	221
Фаза PdH.....	221
Фаза Pd <sub>3</sub> VH <sub>4</sub> .....	222
Параметр порядка фазы Pd <sub>3</sub> VH <sub>4</sub> . Равновесная концентрация вакансий.....	224
Фазовая диаграмма системы.....	227
Заключение.....	231
Литература к параграфу 10.....	232
11. Растворимость водорода в борогидридах и гидридах металла.....	235
Введение.....	235
Построение изоплет и изотерм растворимости водорода.....	239
Заключение.....	243
Литература к параграфу 11.....	244
12. Исследование амида, имида, нитрида, гидрида лития в процессе водородной сорбции.....	249
Введение.....	249
Кристаллические структуры составляющих химических реакций водородной сорбции.....	253
Свободные энергии фаз.....	258
Нитрид лития Li <sub>3</sub> N.....	258
Имид лития Li <sub>2</sub> NH.....	260
Гидрид лития LiH.....	262
Амид лития LiNH <sub>2</sub> .....	262
Растворимость водорода.....	264
Диаграмма состояния фаз.....	266
Изотермы сорбции водорода в фазах. Гистерезисный эффект.....	270
Заключение.....	272
Литература к параграфу 12.....	273
13. Корреляция в распределении атомов внедрения и матричных в ГП в кристаллах состава АВ <sub>3</sub> –С <sub>вн</sub> структуры DO <sub>19</sub> .....	283
Введение.....	283
Теория.....	284
Обсуждение результатов расчетов.....	291
Литература к параграфу 13.....	297
14. Корреляционные эффекты в ГПУ сплавах АВ–С <sub>вн</sub> структур В8 <sub>1</sub> и В19.....	305
Введение.....	305
Сплавы сверхструктуры В8 <sub>1</sub> .....	305
Сплавы сверхструктуры В19.....	314

Обсуждение полученных результатов.....	318
Заключение.....	321
Литература к параграфу 14.....	321
15. Влияние примеси С на параметры корреляции в ГЦК твердых растворах АВ <sub>3</sub> .....	323
Введение.....	323
Свободная энергия сплава.....	324
Уравнения равновесия.....	327
Параметры корреляции при малой концентрации компонента С.....	329
Обсуждение результатов.....	333
Заключение.....	338
Литература к параграфу 15.....	339
16. Растворимость бора и углерода в химических соединениях (FeM) <sub>2</sub> BC.....	343
Введение.....	343
Структура кристалла (FeM) <sub>2</sub> BC.....	344
Свободная энергия.....	348
Растворимость бора и углерода.....	350
Анализ результатов расчетов.....	352
Литература к параграфу 16.....	355
17. Термолиз борогидридов щелочных металлов.....	357
Введение.....	357
Свободная энергия фазы $\alpha = MBH_{x_1}$ , ( $x_1 \leq 4$ ).....	361
Свободная энергия фазы $\beta = MBH_{x_2}$ , ( $x_2 \leq 2$ ).....	363
Свободная энергия фазы $\gamma = MBH_{x_3} + B$ ( $x_3 \leq 1$ ).....	364
Обсуждение результатов расчетов. Интерпретация экспериментальных данных. Построение диаграммы состояния.....	365
Заключение.....	369
Литература к параграфу 17.....	370
18. Изучение фазового расслоения сплава Fe <sub>3</sub> Al при его азотировании по типу DO <sub>3</sub> →G5→B4+D1+A1.....	373
Введение.....	373
Структуры фаз. Параметры порядка.....	374
Свободные энергии фаз. Уравнения равновесия.....	376
Фаза Fe <sub>3</sub> AlN структуры DO <sub>3</sub> .....	377
Фаза AlN структуры B <sub>4</sub> .....	378
Фаза Fe <sub>4</sub> N структуры D1.....	379
Фаза Fe <sub>4</sub> структуры A1.....	380
Анализ результатов расчетов.....	381
Литература к параграфу 18.....	385
19. Дипольное упорядочение в кристаллах структуры DO <sub>9</sub> типа ReO <sub>3</sub> .....	387
Введение.....	387
Теория.....	389
Иллюстрация результатов теории для кристалла WO <sub>3</sub> .....	396

Заключение.....	400
Литература к параграфу 19.....	400
20. Деформационное упорядочение в кристаллах структуры G5 <sub>1</sub> типа	
Н <sub>3</sub> ВО <sub>3</sub> .....	403
Введение.....	403
Параметры порядка. Числа атомных пар.....	404
Внутренняя конфигурационная энергия. Термодинамическая	
вероятность.....	408
Свободная энергия. Уравнения равновесия. Температура	
Кюри-Вейсса.....	409
Термодинамический потенциал. Деформационный параметр	
порядка.....	411
Деформационный гистерезис.....	416
Конфигурационная теплоемкость.....	418
Упругая податливость. Модуль продольной упругости.....	420
Заключение.....	423
Литература к параграфу 20.....	424
<b>Часть II. Фуллереновые кристаллы.....</b>	<b>427</b>
21. Фуллерены: перспективы практического использования.....	427
Введение.....	427
Примеры практического применения.....	429
Заключение.....	434
Литература к параграфу 21.....	434
22. Твердофазные превращения в фуллерите, стимулированные	
перестройкой структуры фуллереновых молекул. Растворимость	
фуллерита в органической матрице.....	443
Введение.....	443
Теория фазовых переходов.....	448
Интерпретация результатов расчетов.....	453
Расчет растворимости фуллерита в органической среде.....	455
Обсуждение результатов расчетов.....	458
Заключение.....	461
Литература к параграфу 22.....	462
23. Формирование фуллереновой монопленки на грани атомарного	
кристалла.....	467
Введение.....	467
Свободная энергия. Уравнение равновесия.....	469
Обсуждение результатов.....	471
Заключение.....	481
Литература к параграфу 23.....	482
24. Многослойная пленка из полых, эндодральных или гидрированных	
фуллеренов на поверхности атомарного кристалла.....	485
Введение.....	485
Свободная энергия пленки.....	486
Равновесные концентрации фуллеренов.....	488

Заключение.....	493
Литература к параграфу 24.....	494
25. Адсорбированный слой из башенных фуллереновых кристаллитов на поверхности металла.....	497
Введение.....	497
Расчет свободной энергии.....	497
Равновесная концентрация фуллеренов.....	501
Заключение.....	506
Литература к параграфу 25.....	507
26. Высокотемпературная трансформация поверхностного фуллерита от фуллеренового монослоя до слоя графита и карбида, поверхностного и объемного.....	509
Введение.....	509
Свободные энергии углеродных фаз. Уравнения равновесия.	
Концентрация углерода.....	511
Монослойный графит.....	513
Поверхностный карбид.....	515
Объемный карбид металла М.....	516
Обсуждение и интерпретация результатов расчетов.....	517
Заключение.....	519
Литература к параграфу 26.....	521
27. Упорядочение фуллеренов $C_{60}$ , $C_{70}$ на грани кристалла.....	523
Введение.....	523
Сверхструктуры моноплёнки фуллерита. Параметры порядка.....	524
Свободная энергия. Уравнения термодинамического равновесия.	
Температура упорядочения.....	530
Квадратная структура (а).....	530
Квадратная структура (б).....	532
Квадратная структура (в).....	534
Гексагональная структура (а).....	536
Гексагональная структура (б).....	537
Гексагональная структура (в).....	539
Интерпретация результатов расчетов.....	540
Теплоемкость.....	543
Заключение.....	546
Литература к параграфу 27.....	547
28. Поверхностное дипольное упорядочение в эндоэдральных фуллереновых тримерах. Растворимость эндоэдралов.....	549
Введение.....	549
Параметры дипольного порядка. Числа пар эндоэдралов.....	552
Свободная энергия пленки.....	553
Уравнения термодинамического равновесия.	
Температура Кюри.....	555
Растворимость эндоэдралов.....	558
Заключение.....	562

Литература к параграфу 28.....	563
29. Магнетизм и ближнее упорядочение в аморфном конденсате из полых и эндоэдральных фуллеренов.....	567
Введение.....	567
Теория.....	569
Интерпретация результатов расчетов.....	575
Заключение.....	581
Литература к параграфу 29.....	583
30. Исследование процесса гидрирования фуллерида платины.....	587
Введение.....	587
Постановка задачи.....	587
Теория.....	589
Фуллерид $\text{FPt}$ .....	591
Гидрофуллерид $\text{FPtH}_x$ .....	593
Гидрофуллерит $\text{FN}_x$ .....	595
Кристалл платины.....	597
Растворимость водорода в фазах $\text{FPtH}_x$ , $\text{FN}_x$ .....	599
Порядок в распределении фуллеренов.....	601
Построение диаграммы состояния.....	604
Заключение.....	607
Литература к параграфу 30.....	609
31. Исследование распада смешанного фуллерита $\text{C}_{60} - \text{C}_{70}$ на фазы разных структур.....	613
Введение.....	613
Сверхструктура молекулярного кристалла.....	614
Расчет фуллереновых пар.....	616
Свободная энергия ромбоэдрической фазы.....	619
Свободная энергия кубической фазы.....	621
Температура фазового расслоения.....	623
Диаграмма состояния.....	624
Равновесные концентрации фуллеренов в двухфазовом фуллерите....	627
Заключение.....	631
Литература к параграфу 31.....	632
32. Температурное упорядочение в конденсате из фторфуллеренов $\text{C}_{60}\text{F}_{48}$ , $\text{C}_{60}\text{F}_{36}$ .....	635
Введение.....	635
Свободные энергии фаз упорядоченной ОЦТ и неупорядоченной ГЦК.....	637
Температура фазового перехода. Уравнение термодинамического равновесия. Диаграмма состояния.....	640
Конфигурационная теплоемкость.....	644
Заключение.....	647
Литература к параграфу 32.....	649
33. Статистическая теория фото- и электрополимеризации фуллеренов..	653
Введение.....	653

Теория.....	656
Свободная энергия фуллерита.....	656
Свободная энергия фазы полимеров.....	657
Фазовый переход. Диаграмма состояния. Равновесные концентрации полимеров.....	658
Заключение.....	663
Литература к параграфу 33.....	664
<b>Часть III. Другие молекулярные кристаллы.....</b>	<b>673</b>
34. Гидролиз борогидридов щелочных металлов.....	673
Введение.....	673
Постановка задачи.....	675
Расчет свободных энергий фаз.....	681
Структурированная вода.....	681
Гидроборид $MВH_{x_1}$ .....	681
Безводный борат $MBO_{2x_2}$ .....	684
Гидратированный борат $MВ(OH)_{4x_2}$ .....	686
Анализ результатов расчетов. Построение фазовых диаграмм.....	688
Исследование химической реакции (34.1').....	689
Исследование химической реакции (34.2').....	693
Заключение.....	697
Литература к параграфу 34.....	698
35. Ферроэластический фазовый переход в гидроксилпатите	
$Ca_5(PO_4)_3OH$ .....	705
Введение.....	705
Структура гидроксилпатита.....	710
Параметры порядка.....	713
Числа взаимодействующих гидроксильных пар.....	714
Свободная энергия.....	716
Уравнения термодинамического равновесия.....	717
Растворимость гидроксила.....	718
Гистерезисный эффект.....	720
Упругая податливость. Модуль продольной упругости.....	724
Конфигурационная теплоемкость.....	726
Заключение.....	728
Литература к параграфу 35.....	730
36. Водород в аланате магния $Mg(AlH_4)_2$ и гидридах алюминия и магния $AlH_3$ , $MgH_2$ .....	739
Введение.....	739
Структура кристаллов.....	745
Аланат магния $Mg(AlH_4)_2$ .....	745
Гидрид алюминия $AlH_3$ .....	751
Монокристалл алюминия.....	751
Гидрид магния $MgH_2$ .....	751
Монокристалл магния.....	752



Интерметаллид $Mg_2Al_3$ .....	752
Свободные энергии фаз. Уравнения термодинамического равновесия.....	753
Аланат магния.....	753
Гидрид алюминия.....	756
Монокристалл алюминия.....	757
Гидрид магния.....	758
Монокристалл магния.....	760
Интерметаллид.....	761
Концентрация водорода в фазах.....	762
Изотермы сорбции водорода. Гистерезисный эффект.....	767
Сорбционная податливость.....	769
Заключение.....	772
Литература к параграфу 36.....	773
37. Фазовый переход параэлектрик-ферроэлектрик в KDP кристаллах структуры $H_{22}$ .....	783
Введение.....	783
Структура KDP кристаллов. Параметры порядка.....	787
Свободная энергия. Уравнения термодинамического равновесия. Температура Кюри.....	791
Конфигурационная теплоемкость.....	797
Термодинамический потенциал. Параметр порядка кристалла в электрическом поле.....	798
Диэлектрическая восприимчивость.....	800
Заключение.....	803
Литература к параграфу 37.....	804
38. Дипольное упорядочение в смешанных KDP и ADP кристаллах дигирофосфата калия-аммония $K_{1-x}(NH_4)_xH_2PO_4$ .....	807
Введение.....	807
Структура кристалла. Параметры порядка.....	808
Внутренняя конфигурационная энергия.....	812
Термодинамическая вероятность. Свободная энергия. Уравнения равновесия.....	817
Диаграмма состояния.....	819
Термодинамический потенциал.....	821
Модуль сдвига. Диэлектрическая проницаемость.....	822
Заключение.....	825
Литература к параграфу 38.....	826
39. Деформационное упорядочение в кристаллах $BiVO_4$ структуры H4 типа шеелита $CaWO_4$ .....	829
Введение.....	829
Структура кристалла. Параметры порядка.....	832
Свободная энергия. Уравнения равновесия.....	835
Термодинамический потенциал. Деформационный гистерезис.....	839
Упругая податливость. Модуль упругости.....	845

Заключение.....	847
Литература к параграфу 39.....	848
40. Сорбционные свойства железо-магниевого и никель-магниевого	
гидридов $Mg_2FeH_6$ , $Mg_2NiH_4$ .....	853
Введение.....	853
Некоторые результаты экспериментальных исследований.....	854
Свободные энергии фаз.....	861
Анализ формул, определяющих P-T-c диаграммы.....	866
Заключение.....	875
Литература к параграфу 40.....	875