**Баянкин, Сергей Яковлевич.**
Октаэдрическая автокомплексная модель строения расплавленных солей : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 02.00.04. - Свердловск, 1984. - 129 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Баянкин, Сергей Яковлевич

ВВВДЕНИЕ

Глава I. СТРУКТУРНЫЕ МОДЕЛИ ЖИДКОГО СОСТОЯНИЯ.

1.1. Ячеечная модель

1.2. Квазирешоточная модель

1.3. Островная модель

1.4. Модель различных структур.

1.5. Те^раэдрическая автокомплексная модель

1.6. Октаэдрическая автокомплексная модель

1.7. Связь между мольным объемом, координационным числом и катион-анионным расстоянием согласно ОАШ.

1.8. Задача исследования.

Глава П. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ РАСПЛАВЛЕННЫХ ПЩ

2.1. Составляющие энергии

2.2. Модификация метода Эвьена

2.3. Кулоновская энергия

2.4. Борновское отталкивание

2.5. Ион-дипольное взаимодействие

2.6. Сравнение с экспериментом

2.7. Топологические характеристики упаковки октаэдров

2.8. Влияние распределения катионов по позициям на значение энергии связи

Глава Ш. ЭНТРОПИЯ ПЛАВЛЕНИЯ ГЩ.

3.1. Энтропия размещения октаэдров.

3.2. Энтропия перестановок катионов

3.3. Энтропия колебаний

3.4. Сравнение с экспериментом

Глава 1У. АКТИВНОСТИ ИОНОВ И СОЕДИНЕНИЙ В СМЕСЯХ

РАШАВЛЕННЫХ СОЛЕЙ.

4.1. Теории растворов.

4.2. Перераспределение ионов при смешении

4.3. Активности ионов. Первое приближение

4.4. Активность соединения. Первое приближение

4.5. Второе приближение: учет взаимодействия со вторыми соседями

4.6. Энтропия смешения. вывода.