**Малючков, Олег Тимофеевич.**

## Особенности структуры и электронного строения гидридов переходных металлов и их сплавов : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.07. - Москва, 1983. - 352 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Малючков, Олег Тимофеевич

Введение.

Глава I. Научно-методические проблемы анализа структуры гидридов и ее связи с некоторыми характеристиками электронного строения.

§ I. Введение.

§ 2. Влияние размеров атомов на закономерности структурных превращений в металлах.

1. Ромбические структуры.

2. Ромбоэдрические и гексагональные структуры

3. О возможности вычисления атомных радиусов элементов на основе структурных соответствий и без эмпирических поправок.

• 4, О соответствии между атомным объемом и атомными радиусами.

§ 3. О возможности использования значений атомных и молекулярных объемов для оценок изменения некоторых параметров электронного строения металлов, сплавов, интерметаллидов.

§ 4. Влияние размеров атомов на формирование структуры интерметаллидов. Молекулярные объемы. Молекулярные коэффициенты заполнения жесткими шарами.

§ 5. Разделение молекулярных объемов на собственные, приходящиеся на один атом в молекуле. Зависимость коэффициентов заполнения жесткими шарами для молекулярных и собственных объемов от соотношения между объемами компонентов для фаз внедрения с ГЦК решеткой матрицы.

1. Соединения типа АВ с заполненными октаэдричес-кими позициями (структуры типа ).

2. Соединения типа АВ, атомы компонента В заполняют половину имеющихся тетраэдрических позиций (структуры типа сфалерита).

3. Соединения типа кВ^ с полностью заполненными компонентом В тетраэдрическими позициями.

Соединения типа АВ с полностью заполненными компонентом В тетраэдрическими и октаэдричес-кими позициями. а) Молекулярный коэффициент заполнения. б) Коэффициенты заполнения жесткими парами собственных объемов матричного и внедренного атомов.

§ 6. Коэффициенты заполнения молекулярных и собственных объемов жесткими шарами фаз внедрения типа АВ с ОЦК решеткой матричного компонента.•

§ 7. Методика определения собственных объемов атомов в бинарных соединениях с помощью структурных данных.

Выводы к I главе.

Глава П. Структурные исследования и анализ изменений некоторых характеристик межатомного взаимодействия в гидридах переходных металлов.

Введение.

§ I. Гидриды палладия и никеля. $ 2. Гидриды ванадия, ниобия, тантала, титана, циркония, гафния. IOO

Г. Общие положения.

2. Гидриды ванадия, ниобия, тантала.

S. Особенности строения гидридов титана.циркония, гафния.

§ 3. Гидриды редкоземельных металлов и иттрия.

I. О структурной неустойчивости тригидридов редкоземельных металлов с гранецентриро-ванной кубической решеткой металлической матрицы.

2. Анализ структурных данных гидридов легких редкоземельных элементов.

§ 4. Некоторые особенности электронного строения гидридов и галогенидов щелочных металлов.

Выводы к П главе. Г

Глава Ш. Диффузия водорода в гидридах переходных металлов