**Уваров, Николай Фавстович.**

## Прогнозирование диффузионных характеристик твердых тел на основании термодинамических параметров плавления : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Новосибирск, 1984. - 130 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Уваров, Николай Фавстович

ВВЕДЕНИЕ.

Г л а в а I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

§ I. Методы оценки диффузионных характеристик в ионных кристаллах и металлах.

1.1. Теоретическая оценка энталыши образования дефекта

1.2. Расчет энтальпий миграции дефекта . II

1.3. Теоретическая оценка энергии активации электропроводности и диффузии в твердых телах.

1.4. Расчет предэкспоненциальных множителей проводимости.ъ.

§ 2. Предсказание суперионных свойств твердых тел

2.1. Криеталлохимический подход.

2.2. Термодинамический подход.

§ 3. Некоторые системы, перспективные для поиска твердых электролитов и проверки зависимостей между параметрами плавления и ионной проводимостью

3.1. Ряд нитратов щелочных металлов

3.2. Молибдат натрия.

3.3. Гидроокиси щелочных металлов

3.4. Галогениды лития.

3.5. Алюмосиликаты натрия со структурой типа карнегиита.

Г л а в а 2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ

§ I. Подготовка образцов

I.I. Нитраты щелочных металлов.

- 2

1.2. Молибдат и вольфрамат натрия.

1.3. Гидроокиси щелочных металлов.

1.4. Галогениды лития.

1.5. Алюмосиликаты натрия

§ 2. Методика измерений электропроводности

2.1. Измерения на переменном токе

2.2. Измерения на постоянном токе.

2.3. Математическая обработка результатов и точность измерений

2.4. Статистическая обработка данных при поиске корреляций

Г л а в а 3. КОРРЕЛЯЦИИ МЕЖДУ ДИФФУЗИОННЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ И ЭНТАЛЬПИЕЙ ПЛАВЛЕНИЯ В РАЗЛИЧНЫХ КЛАССАХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

§ I. Результаты исследований электропроводности, проведенных в данной работе

1.1. Нитраты щелочных металлов.

1.2. Молибдат натрия.

1.3. Галогениды лития.

1.4. Гидроокиси щелочных металлов.

1.5. Алюмосиликаты натрия

§ 2. Поиск корреляций между Н^ и параметрами ионной проводимости в исследуемых системах

2.1. Корреляция между Н^ и ионной проводимостью.

2.2. Корреляция между Н^ и Е&т.

2.3. Зависимости между и фб^ и между и Е&т в алюмосиликатах.

- 3

§ 3. Исследование зависимостей между Н^ и диффузионными параметрами в щелочногалоидных кристаллах и родственных им солях.

3.1. Корреляция между ж //0.

3.2. Зависимости между и f/ju и между

Ufa, и Е&т.

3.3. Учёт предэкспоненциальных множителей проводимости

3.4. Оценка коэффициентов самодиффузии в ЩГК

§ 4. Зависимости между энтальпией плавления и параметрами самодиффузии в металлах

4.1. Корреляция между Н^ и Н0 в металлах

4.2. Оценка.диффузионных характеристик металлов

§ 5. Особенности исследуемых корреляций в суперионных проводниках.

5.1. КЭФ в суперионных соединениях.

Г л а в а 4. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ И ВОЗМОЖНОСТИ ИХ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

§ I. Причины существования наиболее важных корреляций.

1.1. Корреляция между энтальпией плавления и энтальпией образования дефекта в ЩГК и металлах.

1.2. Зависимости между Н^ и Нуи.

1.3. Корреляция между и Egy в алюмосиликатах натрия.

1.4. Компенсационный эффект в проводимости ионных соединений

§ 2. Некоторые применения полученных корреляций

2.1. Оценка основных характеристик ионной проводимости и диффузии в твердых телах

2.2. Зависимость между температурой и энтальпией плавления

2.3. Расчет величины изменения ионной проводимости при плавлении и фазовых переходах в твердом состоянии.

2.4. Использование величины в качестве критерия при поиске новых твердых электролитов

2.5. Ограничения при использовании полученных корреляций.

ВЫВОДЫ. ПО