

Окислы

Исследования

неизвестно
с-б-в

обзоры

Osborn C.G.

Tech. Univ. Norway Trondheim

Тема: Клеи, Бензольные клеев.
9, 79-83

Обзор пермодинамических
с-б-в окислов, Вашильер в
материалах.

1943

O₂-oxide

Justman B.

1946

Steel Processing 32, 1946

Dissociation pressures of
"metal oxides formed in
various solid metals."

CA 1947, 332h.

Окислы

Термодинам.

св-ва

обзор

обзоры

F. D. Richardson, G. Jeffes (1948)

J. Iron Steel Inst. (London)

160, 261-70 ~~160~~

Термодинамика св-ва

вантажа при введении
тепла и газа. Топливо

Даны SF окислов (до 2000°)

Al, Ca, C, Cr, Co, Cu, H, Fe, Mg,
Mn, Mo, Ni, P, S, Na, Si, Ti, W, V.

1951

0

Зудяков Е.М.

Оксиды

металлов

Труды Инст. хим. и мет., Акад. наук
СССР, Ученые зап. кн., 1951, №4, 7-11

Учебная лекция о свойствах
оксидов металлов
ввод в курс лекций, 23 с.

Спб., 1958, 117869

Оксиды

отпуск 3054 1953

Leo Brewer

Thermodynamic properties
of the oxides and their vapor
processes.

Тимохович.

1954

описи

Pelechovitch Y.

Philips Res. Repts, 1954, 9, № 1,
№ 45.

Р(ам)

Исследование продуктов
окисления окислов
щелочноземельных металлов

X-56-19-61011.

1954

Письм.

описи

Petit G.

Bongr. interpr. aluminium,
1954, 1, juin, 45-49.

К теории структурной
металлических окислов титана
 M_2O_3 растворённого в распла-
вленных солях. Замечания по
поводу структуры чистого
расплавленного металлического
окислов.

x-56-22 - 71134.

Ролан.

1954

описала

Rolán M.

Congr. internat. aluminium, 1954/1,
juin, 51-61.

Выведение молекулярных форм
существовавших оксидов алюминия,
магния и бериллия, раство-
ренных в расплавленных фтори-
дах, в чистой NaF , в эвтектике $\text{NaF}-\text{KF}$ и в кристалле по крис-
копическим данным.

X-56-22-71138.

Бревер

Brewer

Univ. of Calif. Rept

1955

Отманы

UCR 2 - 2854 (rev) Nov. 1955r.

обзор

По словам Л. Гурвича, новый
обзор по тематам образования
и искривления отмычек (W, Mo, Cr)

1955

Dr. [Signature]

Tripp H.P., King B.W.,
Y. Min. Ceram. Soc., 1955, 32, 432.

Термодинамические функции
чисел ир. иррациональн. температур.
Турх.

Теперь

cl.

05/11

Даны тригонометрические выражения
 ΔF образующих боковых поверхностей
 вписанных в усеченный конус
 с $\alpha = 0,2400$

Ch. A., 1956, 141569

Удрук.

1955

Описи

Ulrich J.

Deutsch. Nationalbibliogr., 1955, 13,
N.º 19, 1347.

p(am)

Измерение давления пара и
исследование термического
поведения сульфидов. титан-
овых металлов и оксидов.

х-56-15-46340 Д.

О.

Фостер, Уэллс.

1/1956

описи

Foster P.K., Welch H.G.

Trans. Faraday Soc., 1956,
52, No 12, 1636-1636-1642.

Твердые растворы метал-
лических оксидов. Часть 2.
Соотношения активностей
в твердых растворах оксидов
титана и оксид марган-
ца

X-18-58-60135

за

Росс.

1956

Росс. № 3.

окислы
окисление

Schweiz. Buch, 1956, 1356, № 1, 10.

Исследование процессов
окисления.

Х - 56 - 18 - 54808 Д.

Белая Л.В.

1957

Описав

Ученые знания, 1957, 26,
№ 9, 1070-1086

Обзор

Механизм восприятия информации
оценки твердых материалов
обзор. Библ. 147 назв.

X-58-11-35462

11352

0

Технический

Glassner A.

ссылка

U.S. Atomic Energy Commission
Document, ANL-5750, 70 pp

проект

непринят

по 250001

Сидоров П. А.

1957

Автореф. дисс. канд. физ. мат.
Физ. ин-т. А. Н. ССР. М., 1957

Инфракрасные спектры и
структура некоторых
стеклообразующих окислов.

опиши
ИКС и
структура

X- 58 - 5 - 136718.

О-окины

1958

Амз, Морозов

Мох, 1958, 28, 2617

Исход. Вармаунт шт и др. св-в

от излучения света в

Светлых металлы — охотничьи

1958

0
Оксиды
металлов

Тейерс, Манно

Peteris H., Mann G.

Naturwissenschaften, 1958,
45, №9, 209.

Электродохимические изуче-
ние восстановительных
равновесий оксидов лантано-
идов.

X-59-3-7465

Berkowitz J.

1959

Откуда

J. Chem. Phys., 1959, 30, N3, 858

Do
(обзор)

Correlation Scheme for Diatomic
Oxides

Приведены энергии диссоциации LiO , BeO ,
 BeO^+ , Bo^+ , Bo , Co^+ , Co , No^+ , No , O_2^+ , O_2 , Fo^+ , Fo ,
 NaO , MgO^+ , MgO , AlO^+ , AlO , SiO^+ , SiO , Po^+ , Po ,
 SO^+ , SO , CeO^+ , CeO

Описание

Liley D.T., (U.K. At. Energy Res. Estab.)

1959

J. Less-Common Metals, 1, 145

Осзор

Стабильность оксидов и азидов при
высоких температурах -

ΔF_f , T_m , P марганцевых оксидов и азидов,
разложение при 2000°K.

Лукс, Кухв, Нидермайер. 1959.

O₂
перекиси

Lux Hermann Kuhn Rudolf,
Niedermayer Titus.

Z. anorgan und allgem. Chem,
1959 298, N 5-6, 285-301.

Факции и равновесие в рас-
падах циклических гидрокарбонатов
III. Равновесие перекисей

X-59-19-67246. ●

1960

Оксиды
металлов

9Б342. Термодинамические свойства некоторых окислов металлов, растворенных в расплавленном метафосфате натрия. Андреева В. Н., Делимарский Ю. К. «Ж. неорганич. химии», 1960, 5, № 9, 2075—2083.—В продолжение работы (см. реф. 9Б341) и таким же методом при т-рах от 720 до 960° измерены э.д.с. цепей типа $M/\text{расплав } MO (N) \text{ и } NaPO_3/O_2(Pt)$ (N — мол. доля окисла в расплаве). По полученным результатам рассчитаны активность, изобарный потенциал, энтропия и энтальпия MO в расплавах. При внесении Bi_2O_3 (N от 0,01 до 1,0) в $NaPO_3$ происходит значительное хим. взаимодействие при незначительной деполимеризации $NaPO_3$, а при внесении NiO (N от 0,005 до 1,0) — интенсивная деполимеризация $NaPO_3$ при незначительном хим. взаимодействии. Для $M = Mo$ и Sb и $M = MoO_3$ и Sb_2O_3 хим. цепи обратимы из-за побочных р-ций (восстановление Mo до низших валентностей, образование высших кислородных соединений Sb). Все опытные и расчетные величины табулированы.

А. Стрельников

2.1961.9

1960

описан

IV группы

8Б414. Диаграммы состояния системы элементы
IV группы — кислород. Корнилов И. И. «Тр. комис.
по аналит. химии. АН СССР», 1960, 10, 17—26.—Обзор.
Библ. 18 назв.

ж. 1961. 8

1960

0
(Dkucib)

D Thermodynamic properties of oxide solid solutions.
Walter C. Hahn, Jr. (Pennsylvania State Univ., University Park). *Univ. Microfilms* (Ann Arbor, Mich.),
L.C. Card No. Mic 60-2157, 103 pp.; *Dissertation Abstr.* 21,
163(1960). P M R

C.A. 1961. 55. 3. 2260d

VI зр.
Окислы

Аскерман, Торн

1961

4Б301. О закономерностях в термодинамических свойствах и в испаряемости. Askerman R. J., Thorn R. J., Winslow G. H. Systematic trends in vaporization and thermodynamic properties. «Planet. and Space Sci.», 1961, 3, 12—23 (англ.).—Показано, что для тугоплавких окислов во всех процессах, в которых электронные конфигурации в начальном и конечном состояниях одинаковы, изменение теплоты испарения (ΔH) и энтропии взаимосвязаны, так что при исследовании термодинамич. свойств достаточно изучить изменение только одной из этих величин, предпочтительнее ΔH в зависимости от атомного номера (Z). При колич. определении относительной стабильности твердых и газообразных окислов и металлов получено, что метод мол. орбит может быть успешно

РЖХ 1962
4Б301

См. на обороте

применен к описанию зависимости энергии диссоциации газообразных окислов от Z только для регулярных или В-подгрупп периодической системы. Без введения дополнительного параметра эта теория не объясняет роста энергии диссоциации с увеличением Z , который наблюдается в группе Ca, Sr, Ba и Ra и в переходных группах. Этот же параметр определяет относительную стабильность твердых окислов и металлов.

Р. Ф.

11961

20Б263. Газообразные окислы платиновых металлов. Алcock С. В. The gaseous oxides of the platinum metals. «Platinum Metals Rev.», 1961, 5, № 4, 134—139 (англ.).—Обзор эксперим. техники и результатов определений термодинамич. функций PtO_2 , RhO_2 , IrO_3 , RuO_3 и OsO_3 в области т-р 1200—1800°. В. С.

2. 1962. 20

схем

Окислы, испарение 4365

"Progress in Ceramic Science"

Ed. Burke J. E., vol. I

Pergamon Press, L.-N.-P.

1961, стр. 39-88



11961

Окислы

ЗБ440. О размягчении окислов и их способности к стеклообразованию. Garino-Canina Vittorio. De la fusion pâteuse et de l'aptitude à vitrifier des oxydes. «C. r. Acad. sci.», 1961, 252, № 12, 1807—1809 (франц.).—Рассмотрены причины того, что у окислов (SiO_2 , GeO_2 , P_2O_5 , Be_2O_3 и др.), способных к стеклообразованию, наблюдается явление размягчения. Установлено, что при рассмотрении объема решетки как суммы объемов катионов, анионов и пустот вышеупомянутые окислы характеризуются высокими значениями отношения объема пустот к объему катионов (порядка 10—100) и большим зарядом катионов (≥ 3). У окислов, для которых размягчение не наблюдается, вышеуказанное отношение имеет величину порядка нескольких единиц и крайне редко доходит до 10. Отмечено, что способность к стеклообразованию может быть связана вероятностью наличия в кристаллич. решетке дефектов типа Френкеля (пар: вакансия — внедренный атом).

А. Никеров

X. 1962.3

1961

13Б286. Застекловывание простых окислов. G a r i-
 no - C a n i n a V i t t o r i o. De la vitrification des oxydes
 simples. «C. r. Acad. sci.», 1961, 252, № 21, 3293—3295
 (франц.).—Застекловывание простых окислов, являю-
 щихся хорошими стеклообразователями (SiO_2 , GeO_2 ,
 P_2O_5 , V_2O_5 и т. д.), интерпретируется на основании
 представлений о свойственных им в значительной ме-
 ре дефектов типа Френкеля. В качестве параметров,
 определяющих процесс застекловывания, приводятся
 отношение объемов совокупного пустого пространства
 и занимаемого катионами V_n/V_k и энергия образования
 дефектов $\Delta U \simeq nE_f$ (U — внутренняя энергия, E_f —
 энергия образования одного дефекта, n — конц-ия де-
 фектов). Такой подход охватывает собой известные
 факторы стеклообразования (существование направ-
 ленных частично гомеополярных связей, малые разме-
 ры и большой заряд катионов). С другой стороны, он
 приводит к двум моделям стеклообразных в-в, с по-
 мощью которых могут быть объяснены их свойства:
 «кристаллической» (наличие дезориентированных кри-
 сталлич. доменов) и «беспорядочной решеткой», обра-
 зуемой в результате смещений атомов и деформаций
 связей.

Б. Звягин

VI
 Ошибка

х. 1962. 13

11951

O₂

Окислы

р

6Б275. Свободные энергии образования окислов металлов в газообразном состоянии. Gleiser Molly. Free energies of formation of gaseous metal oxides. «Trans. Metallurg. Soc. AIME», 1961, 221, № 2, 300—304.— Построены диаграммы температурной зависимости стандартной свободной энергии образования окислов ряда тугоплавких металлов в твердом и газообразном состоянии. По литературным данным табулированы теплоты образования некоторых окислов в газообразном состоянии. Приведенные данные позволяют предсказать состав газовой фазы над твердым окислом при высокой температуре. А. Комарова

2.1962.6.

1961

Глейзер

0-

Free energies of formation of gaseous metal oxides. Molly Gleiser (Massachusetts Inst. of Technol., Cambridge). *Trans. AIME* 221, 300-4(1961).—The temp. dependence of the free energies of formation of gaseous metal oxides/mole of O and per mole of metal are plotted in two large graphs. Metal oxides that vaporize to gases of the same mol. formula are not included. Use of graphs of this type has been discussed by Ellingham (CA 38, 4888⁹).

A. W. Czanderna

C.A. 1962, 53, 10

11001i

Окислы

1Б342. Уточненная диаграмма сродства элементов к кислороду и ее применение для термодинамического исследования восстановительных процессов в доменной печи. Сигов А. А., Шурхал В. А. «Изв. высш. учебн. заведений. Черн. металлургия», 1961, № 4, 15—25.—Из литературных значений энтальпий и энтропий вычислены зависимости стандартного изменения термодинамич. потенциала от т-ры для р-ций образования различных окислов. Приведены уточненные диаграммы $\Delta Z = f(T)$ р-ций, важных для понимания доменного процесса. С точки зрения полученных результатов трактуются термодинамич. возможности восстановления металлов из окислов водородом или окисью углерода в зависимости от состава газовой фазы и концентрации восстанавливаемого металла в чугуне.

А. Грановская

Термод.
св-ва

X. 1962. 1.

1961

Relations among enthalpies of formation of oxides and oxychlorides. B. N. Sharupin and I. V. Vasil'kova (State Univ., Leningrad). *Zhur. Obshchei Khim.* 31, 2077-8 (1961).—The existing data on enthalpies of formation of metal oxides and oxychlorides indicate that such enthalpies are substantially identical for pairs of oxides and oxychlorides as follows: MO_x-MOCl_x , $MO_x-MO_2Cl_2$, and $M_2O_x-MOCl_x$, where M is a metal: La, Fe, Sm, Al, Zr, Ti, U, Cr, Mo, W, or U. This is evidently caused by the similarities in at. distribution in the crystals of such a set of paired compds. The method can be used to det. the enthalpies of formation of oxychlorides from known data on the corresponding oxides.

G. M. Kosolapoff

C. A. 1961. 55. 26
 26637c

1961

O₂Оксислы

элементов

IV, V и VI

8B16. Препаративное и спектроскопическое исследование кислородных соединений элементов IV, V и VI групп периодической системы. Simon Arthur. Präparative und spektroskopische Untersuchungen an Sauerstoffverbindungen der Element der 4., 5. und 6. Gruppe des Periodischen Systems. «Wiss. Z. Techn. Hochschule Dresden», 1961, 10, № 3, 439—448 (нем.).— Обзор работ, проведенных в Ин-те неорганич. химии Высшей технич. школы г. Дрездена. Библ. 66 назв.

х. 1962. 8.

1962

VI
 O (Окисл) Armstrong W.M., Chaklader A.C.D.,

MoO_3 Селле M.L.A.,

V_2O_5 J. Amer. Ceramic Soc.,

Nb_2O_5 1962, 45, №9, 407

TaO_2 (таз) Реакции между металлами и
 керамикой. Тугоплавкие металлы -
 расплавленная SiO_2

ΔF
 (сбзр)

1962

О-окислы Brewer L., Rosenblatt G.

Trans. Metallurg. Soc. AIME,
1962, 224, no 6, 1268.

Термодинамика испарения
окислов

Ж. 1964-12, 5415

~~19-01111111~~
~~19-01111111~~

Chipman J.

1962

~~660-5111~~

Pure Appl. Chem., 5, 669

\$ - molten metals slags
and the third law.

(an CO

C.A. 1963. 58. 6

5106 a

osm...

25381 VOLATILE OXIDES OF SOME IMPORTANT
MATERIALS USED IN NUCLEAR TECHNOLOGY. E. H. P.
Cordfunke (Reactor Centrum Nederland, Petten, Netherlands). Preprint SM-26/16. 17p. (In English)

To be published in the Proceedings of the IAEA Symposium on the Thermodynamics of Nuclear Materials held in Vienna, 21-25 May 1962.

A survey is given of data available at present on the volatile oxides of some important materials used in nuclear technology. A short description is given of the main experimental methods for identifying the volatile species and the accuracy of these methods, briefly illustrated with some examples. Next, attention is given to the formation of the volatile oxides of uranium and plutonium. Finally, some other materials are discussed, mainly refractory oxides, such as alumina, silica, zirconia a.o. As far as possible, free energy equations and graphs are presented which permit the elucidation of the thermodynamics of the volatile oxides. (auth)

1962

NSA-1962-16-19

О-ошибка

Al_2O_3

ZrO_2

ThO_2

1 Б369. Выдерживание веществ при температурах выше точки плавления «контейнера». Grosse A. V., Leutner H. W., Murphy W. J., Stokes C. S. The high temperature containment of substances above the melting point of the container. «J. Amer. Chem. Soc.», 1962, 84, № 16, 3209—3210 (англ.)

Для исследования жидкофазных р-ций при высоких т-рах (до $5000^{\circ}K$) сконструирован хим. реактор-центрифуга, нагреваемый плазменной струей (т-ра плазмы $10\,000$ — $17\,500^{\circ}K$; см. РЖХим, 1961, 7И14). Для исследования взаимодействия между металлом и расплавленным окислом металл вводится на поверхность жидкой окисной трубки, сохраняющей свою форму вследствие вращения. Для применения этого принципа необходимо, чтобы плотность расплавляемого металла была меньше плотности жидкого «контейнера». Указываются температурные интервалы применения окисных «контейнеров»: Al_2O_3 2288 — $3800^{\circ}K$, ZrO_2 3000 — $4600^{\circ}K$, ThO_2 3300 — $4700^{\circ}K$.
Л. Резницкий

1962

X. 1964.1

1962

19 Б275. К теории окислительно-восстановительно-го равновесия в окислах. Мень А. Н. «Ж. физ. химии», 1962, 36, № 11, 2313—2316 (рез. англ.)

Получено выражение для константы равновесия реакции взаимодействия многокомпонентного твердого р-ра, содержащего катионы одного и того же элемента в двух валентных состояниях, с газом кислорода. В качестве примера обсуждается влияние добавки окиси магния в вюстите на восстановление трехвалентного железа.

Резюме автора

Окислы

ж. 1963. 19

0-ошибка

21 Б164. Ряд давлений кислорода и его применение в технологии полупроводников. Renner Th. Die Sauerstoffspannungsreihe und ihre Anwendung auf die Technologie von Halbleitern. «J. Phys. and Chem. Solids», 1962, 23, Nov., 1587—1596 (нем.; рез. англ.) 1962

Рассчитаны свободные энергии (μ) диссоциации окислов. Эти величины, по аналогии с электрохим. рядом напряжений могут быть расположены в виде «ряда давлений кислорода», который позволяет определить изменение свободной энергии при протекании хим. р-ций, связанных с переносом кислорода. Приведены графики зависимости μ от давления и т-ры для ряда окислов: SeO_2 , SiO , CeO , CuO , CO , TeO_2 , Cu_2O , Bi_2O_3 , SO_2 , Al_2O_3 , $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{Fe}_2\text{O}_3$, As_2O_3 , CO_2 , Sb_2O_3 , H_2O , CdO , GeO_2 , FeO , $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{FeO}$, CO_2/CO , P_2O_3 , In_2O_3 , $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{FeO}$, Ga_2O , ZnO , Ga_2O_3 , $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{Ga}_2\text{O}$, B_2O_3 , SiO_2 , Al_2O_3 , MgO , CaO , SiO_2/SiO . Рассмотрено применение этих величин для оценки поведения материалов при синтезе полупроводников (в частности — поведения чистого кварца и кварца, покрытого углеродом). В. Нешпор

X. 1963. 21

1963

Оксиды ①

(обзор)

/ 13 Б394. Физико-химическая характеристика окислов и некоторых кислородных соединений. Береж-ной А. С. «Сб. научн. тр. Укр. н.-и. ин-т огнеупоров», 1963, вып. 7(54), 115—161
Обзор. Библ. 56 назв.

х. 1965. 13

О -
окислы
металлов

1963
6 Б178. О составе и строении окисных слоев металлов. Kirsch Helmut. Über die Zusammensetzung und Struktur von Metalloxydschichten. «Maschinenmarkt», 1963, 69, № 24, 20—26 (нем.)

Обсуждаются состав и строение окисных пленок, полученных на различных металлах. На Fe отмечен следующий порядок расположения слоев: Fe/FeO/Fe₃O₄/α-Fe₂O₃/ воздух или вода (при нормальном давлении). Рассмотрена геометрич. связь ориентации различных окислов; решетку FeO и Fe₃O₄ можно получить поворотом осей в α-Fe на 45°. На поверхности металлич. Zn, имеющего гексагон. решетку с параметром 2,68 Å, выращена ориентированная окисная пленка с параметром 2,686 Å (ZnO имеет гексагон. решетку с параметром 3,22 Å). На Cu, имеющей плотнейшую куб. упаковку, в атмосфере O₂ получены кристаллы куб. Cu₂O с осями, параллельными осям в металлич. Cu; при окислении на воздухе получена CuO с монокл. структурой. На металлич. Al (куб. симметрия) в зависимости от т-ры окисления получена аморфная Al₂O₃ или γ-Al₂O₃, имею-

см. н/аб.

х. 1964.6

щая куб. решетку. Указано, что переход за аморфной Al_2O_3 в $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ происходит вблизи 680° . Отмечено, что гексагон. кристаллы Mg на воздухе покрываются аморфной пленкой, которая при нагревании переходит в куб. MgO, определенным образом ориентированную на поверхности Mg. При нагревании сплава 30% Zn+70% Cu получена чистая пленка ZnO, при нагревании сплава Cu+3% Al — пленка $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$. При нагревании сплава Al+2—8% Mg при $120\text{—}350^\circ$ получена пленка $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$; выше 350° поверх слоя $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ образуется слой MgO вследствие увеличения скорости диффузии Mg по сравнению с Al. Указано, что на поверхности жидких металлов образуются окисные пленки из мельчайших кристаллов, из которых формируется монокристалльный слой при охлаждении расплава.

Л. Ерман

1963

0 -
-omualb

The use of CO-CO₂ atmospheres for the preparation and free energy determinations of several oxide systems. W. Kunnmann, D. B. Rogers, and A. Wold (Massachusetts Inst. of Technol., Lexington). *J. Phys. Chem. Solids* 24(12), 1535-8 (1963). A no. of transition metal oxide systems were prepd. that require controlled CO-CO₂ atm. for attaining certain desired valencies. In addn. standard free energies for numerous mixed oxides are detd. by a direct evaluation of the equil. atm.

RCKH

C.A. 1964. 60. 5

50468

Орден А - 1375а) 1963
Знаменос Оlette M.
Ancey - Moret M.F
(46, p) Rev. de Metallurgie
juin 1963, 569-81.

1963

O-
OrmauerReprints
references

Inorganic superoxides. A. W. Petrocelli and D. L. Kraus
(Gen. Dynamics/Elec. Boat, Groton, Conn.). ~~J. Chem. Educ.~~
40, 146-9(1963). A review with 44 references. CA

C.A. 1963-58.10
9859g

1963

Oxide
metal.

(Tm)

Oxide

2) Compilation of the melting points of the metal oxides. Samuel J. Schneider. *Natl. Bur. Std. (U.S.) Monograph 68*, 31 pp. (1963). 131 references. SNTT

C.A-1963-59-13
145908

1963

O-
onucan

Determination of solubility constants of metal oxides and hydroxides. P. Schindler (Univ. Bern, Switz.). *Chimia* (Aarau) 17(10), 313-31(1963)(in German). A thesis abstract with 65 references.
Roberta H. Brandenberger

Рацион,
р-примор

C.A. 1964. 60. 1
516

Окислы

1964

2 Б492. Изобарно-изотермические потенциалы окис-
лов, некоторых субокислов и карбидов металлов. Ко-
жевников Г. Н., Ефрекин В. В. «Тр. Ин-та ме-
таллургии. Гос. ком-т по черн. и цветн. металлургии
при Госплане СССР», 1964, вып. 10, 36—41

Приведены диаграммы зависимости изобарно-изотер-
мич. потенциала от т-ры некоторых окислов, карбидов
и субокислов. В. Ш.

Т.ф.

(+1)

х. 1966. 2

Д

1964

О-ошибка

19 Б348. К алюминотермическому восстановлению трудновосстановимых окислов. Кожевников Г. Н., Ефремкин В. В., Микулинский А. С. «Цветн. металлы», 1964, № 1, 75

Новые возможности алюминотермич. метода основаны на восстановлении Al трудновосстановимого окисла редкого Me с удалением O в виде субокислов Al. Приведены результаты термодинамич. расчетов изобарного потенциала для р-ций восстановления окислов Be, Th и Zr с образованием AlO и Al₂O. Восстановлением BeO при 1350—1450° и остаточном давл. 10^{-2} — 10^{-3} мм рт. ст. получен сплав на основе Al с содержанием 2% Be. При восстановлении до субокислов несколько повышается расход Al, но субокислы при охлаждении разлагаются на Al и Al₂O₃ и из такой смеси легко выделяется Al. Сплав Ti с Al с миним. содержанием O можно получать методом алюминотермич. восстановления TiO₂.

И. Дискина

X. 1964.19

1964

0-
Окислы

18 Б264. Нейтронографическое изучение окислов типа $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Ширани Д. «Изв. АН СССР. Сер. физ.», 1964, 28, № 3, 446

Обзор последних работ. Библ. 2 назв.

X.1965. 18

1964

Оксиды

18 Б588. Исследование двойных окислов переходных металлов. Сообщение II. Системы $\text{TiO}_2\text{—NbO}_2$ и $\text{TiO}_2\text{—TiTaO}_4$. Rüdorff Walter, Luginsland Hans-Hermann. Untersuchungen an ternären Oxiden der Übergangsmetalle. II. Die Systeme $\text{TiO}_2\text{—NbO}_2$ und $\text{TiO}_2\text{—TiTaO}_4$. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1964, 334, № 3-4, 125—141 (нем., рез. англ.)

Изучены магнитные и электрич. свойства тв. р-ров с рутиловой структурой в системах $\text{TiO}_2\text{—NbO}_2$ и $\text{TiO}_2\text{—TiTaO}_4$. В системе $\text{TiO}_2\text{—NbO}_2$ формируются тв. р-ры ряда $(\text{Ti}_{1-x}\text{Nb}_x)\text{O}_2$ (I), параметр решетки a к-рых увеличивался равномерно от 4,593 при $x=0$ до 4,840 при $x=1$; параметр c для состава $(\text{Ti}_{0,5}\text{Nb}_{0,5})\text{O}_2$ имеет максимум, а в области $0,5 \leq x \leq 1$ остается постоянным. Это связано с образованием пар Nb—Nb и замещением Ti^{4+}

X. 1966.18

на Nb^{4+} . Отмечается, что металлич. связь в парах обус-
 ществляется через d -электроны. Переход от рутиловой
 структуры к NbO_2 установлен при $x=0,75$. Магнитная
 восприимчивость (χ) определялась по методу Гун при
 78—473°K для различных по напряженности полей (от 2
 до $1,5 \cdot 10^3$ гс). Найдено, что $\chi_{Nb^{4+}}$ с уменьшением x
 увеличивается, а кривая зависимости магнитного момен-
 та μ (эф.) имеет обратный ход. Тв. р-ры с $x \leq 0,2$ под-
 чиняются закону Кюри—Вейсса и $1/\chi$ прямолинейно за-
 висит от т-ры. Путем экстраполяции значений $\chi_{Nb^{4+}}$ най-
 дено, что μ (эф.) стремится к макс. значению 1,90 спи-
 нового момента. Уд. проводимость κ ($\kappa(NbO_2) =$
 $= 10^{-4}$ ом $^{-1}$.см $^{-1}$) на 3 порядка увеличивается для
 $x=0,5$. При уменьшении x значение κ падает, доходя до
 значения для чистого NbO_2 при содержании 7% мол.
 Nb^{4+} . Максимум κ объяснен электронным переходом
 $Ti^{4+} + Nb^{4+} = Ti^{3+} + Nb^{5+}$. Область гомогенизации рути-
 ловой фазы для тв. р-ров ряда $(Ti_{1-x}Ta_x)O_2$ существует
 от 0 до $x=0,5$. Параметры a и c линейно увеличивают-
 ся с увеличением x . При $x=0,5$ образуются тв. р-ры
 $(Ti_{1-2x}^{4+}Ti_x^{3+}Ta_x^{5+})O_2$, что найдено при измерении χ и κ ,
 поведение к-рых существенно отличается от ряда I. χ в
 5 раз выше, а влияние диамагнитного разбавления Ti^{4+}
 меньше, чем в ряду I. Препараты с $x \leq 0,4$ следуют
 ур-нию Кюри—Вейсса; при $x > 0,4$ наблюдается резкое
 отклонение от этого ур-ния. κ имеет максимум при
 $x=0,2$ и минимум при $x=0,5$. Максимум κ объяснен
 переходом электронов между Ti^{3+} и Ti^{4+} . Абс. значение
 κ значительно меньше, чем в ряду I. Сообщение I см.
 РЖХим, 1959, № 8, 26313.

Б. Доброцветов

Окислы

1964

18 Б589. Исследование двойных окислов переходных металлов. III. Рутитовая фаза $(V_{1-x}Nb_x)O_2$. Rüdorff Walter, Märklin Jörg. Untersuchungen an ternären Oxiden der Übergangsmetalle. III. Die Rutilphase $(V_{1-x}Nb_x)O_2$. «Z. anorgan. und allgem. Chem.», 1964, 334, № 3-4, 142—149 (нем., рез. англ.)

Исследовано строение и измерены кондуктометрич. и магнитные свойства тв. р-ров ряда $(V_{1-x}Nb_x)O_2$. Установлено, что при $x=0,1—0,9$ они имеют тетрагон. структуру рутита. Получена прямолинейная зависимость параметров решетки a и c от состава тв. р-ров. При $x=0,5$ отмечен максимум магнитной восприимчивости (χ). На основании сопоставления экспер. значений χ и вычисленных по закону Кюри—Вейсса найдено, что при $x=0,5$ существуют 2 ряда тв. р-ров $(V_{1-2x}^{(4+)}V_x^{(3+)})Nb_x^{(5+)})O_2$ (I)

X. 1966. 18

Окислы

1964

0-

10 Б661. К определению концентрационной зависимости активностей компонентов для простых бинарных окислов. Журавлева М. Г., Мень А. Н., Чуфаров Г. И. «Докл. АН СССР», 1964, 159, № 4, 879—881.

Получено выражение для активностей a компонентов в бинарных твердых р-рах окислов типа MO , включающее параметр, который ~~может быть~~ определен при наличии одной эксперим. точки на кривой $a(c)$, где c — конц-ия, а также вычислен из выражения свободной энергии смешения.

Реферат авторов

х.1965.10

1965

Миния

Синица

и

окислов

13 M27 K. Исследования в области химии силика-
тов и окислов. Сб. статей. Ред. Августиник А. И.
(АН СССР. Отд. общ. и техн. химии. Ред. «Ж. прикл.
химии»). М.—Л., «Наука», 1965, 314 стр., илл., 2 р.

X. 1966. 13 M

Окисел

1965

9 Б568. Расчет энергии связи в окислах. Аппен А. А., Глушкова В. Б., Каялова С. С. «Изв. АН СССР: Неорган. материалы», 1965, 1, № 4, 576—582

Составлена таблица стандартных энергий атомизации окислов 62 элементов. Расчеты выполнены, исходя из энтальпий образования окислов и сублимации металлов. С учетом наиболее вероятной координации атомов в кристаллах и силикатных стеклах оценены энергии связей металл — кислород.

Реферат авторов

термический

X. 1966.9

О-
Окислы

1965

2 Б500. Термодинамика восстановления окислов гидридом натрия в щелочном расплаве. Богоявленская Н. В., Черненко В. И., Бабченко В. А., Выдра Э. И. «Укр. хим. ж.», 1965, 31, № 8, 793—798

Произведенные расчеты позволяют теоретически определять возможность восстановления различных окислов в расплаве щелочи с гидридом натрия. Описаны резуль-

таты опытов по удалению продуктов окисления с поверхности образцов из сплавов на основе Fe, Ni, Ti и Cr, проведенных в лабор. условиях. Результаты расчетов хорошо согласуются с лабор. и полупромышленными опытами. Резюме авторов

Кр

1965

0-

Тугоплавкие
окислы

23 Б579. Исследование сублимации и конденсации паров тугоплавких окислов в плазменной печи. Dauvergne Jean Pierre. Etude de la sublimation et de la condensation de vapeurs d'oxydes refractaires dans un Tour à plasma. Thès. Doct. sci. appl. Fac. sci. Nancy. Nancy, 1965, 125 p., ill. (франц.)

Описывается конструкция установки, состоящей из плазменной печи, калориметра для измерения энтальпии порошков после обработки в плазменной печи, испарителя-конденсатора. Разработана теория термич. обработки порошков в плазме. Выведены уравнения нагрева зерна в плазме для случаев, когда в зерне не проис-

X. 1968. 23

ходит никаких превращений, для случая плавления, случая испарения, при эндотермич. и экзотермич. хим. р-циях. Даны уравнения градиента температуры внутри зерна для всех рассмотренных случаев. Проведены опыты для изучения теплопередачи в различных условиях. Экспериментально установлены траектории частиц в плазме. Изучена конденсация пара в токе плазмы вблизи холодной стенки. Рассмотрены структуры и текстуры конденсатов SiO_2 , Al_2O_3 и ZrO_2 .

Д. Л. А.

1965

0
Тугоплавкие
окислы

Сублимация
конденсации
паров

12 Г108 Д. Изучение сублимации и конденсации паров тугоплавких окислов в плазменной печи. D'auteur: Vergne Jean Pierre. Etude de la sublimation et de la condensation de vapeurs d'oxydes refractaires dans un four à plasma. Thès. Doct. sci. appl. Fac. sci. Nancy. Nancy, 1965, 125 p., ill. (франц.)

фр. 1968. 12 Г

Гуммз

Nonstoichiometry of oxides. E. Gillis (Univ. Ghent, Belg.).
Silicates Ind. 30, 171-80(1965). Imperfect single crystals of
oxides are classified into 2 principal groups, i.e. contg. excess
metal, or excess O; the 1st group has either anionic gaps (empty
sites in the structure) or interstitial metal atoms, and the 2nd
group either cationic gaps (empty sites) or excess O atoms.
Semiconduction and photocond. phenomena are direct conse-
quences of these structural defects which are detd. by investiga-
tions of color centers and paramagnetic resonance behavior, or
simply by a study of anomalies in ds. For the classification of
different types of defects in oxide structures, the advantages and
disadvantages of the systems developed by Rees (*Chemistry of
the Defect Solid State*, London: Methuen and Co., 1954, 136 pp.),
Wagner, Schottky (*CA* 30, 346⁸) and Kroeger (*Chemistry of Im-
perfect Crystals*, Amsterdam: Swets and Zeitlinger, 1964, 103a
pp.) are discussed. For practical reasons, the symbolism pro-
posed by K. (*loc. cit.*) is adopted and recommended for the de-
scription of different types of surface and interior reactions,

Окислы
неустойчиво
металлов

1965

C. A. 1965. 63. 10
126416

neutrality, and structure conditions. This includes the characteristics of ionic or electronic conductance, at elevated temps. when all the equil. are relatively rapidly established. After cooling (freezing-in) but above $T = 0$, the probability relations of Fermi-Dirac postulate the presence of ionized acceptors and donor qualities, which det. the n or p cond. type of semiconductors, depending on the concn. and mobility of the charged structural units, as a function of the partial pressure of constituent B in compd. AB . The validity of the general rules is demonstrated for the specific behavior of BaO , Cu_2O , ZnO , and TiO_2 , all with slight deviations of stoichiometry. However, for TiO_2 and V_2O_5 , there are also strong deviations causing phase changes and domain structures (Ashbee and Smallman, *CA* 59, 4605b; G., *CA* 61, 3766b), which are related to plastic deformation (of rutile) and catalytic activity (for $V_2O_5 \rightleftharpoons V_{12}O_{28}$, with very specific structural stacking).

W. Eitel

0-
Окислы

1965

2 14 B560. Термохимические свойства и устойчивость окислов переходных металлов. Kubaschewski O. ~~The thermochemical properties and stability of transition~~ metal oxides. «Bull. Soc. chim. France», 1965, № 4, 1170—1174. Discuss., 1174—1175 (англ.)

Доклад на международном коллоквиуме (см. РЖХим, 1966, 7B38). Используя термодинамич. св-ва окислов переходных металлов (ΔG_{O_2} — свободная энтальпия диссоциации кислорода; p_{O_2} — давл. диссоциации кислорода), подробно рассматриваются устойчивость и нестехиометричность этих соединений. Вопросы, связанные с р-рением кислорода в решетках переходных металлов, обсуждаются с точки зрения применения закона Генри. И. Волкова

х. 1966. 14

0-
Окислы
Тройные

1965

12 В66. Нестехиометрические тройные окислы вольфрама и ванадия с одновалентными металлами. Stru-
sievici Constanța, Lukács Ileana. Oxizi ter-
nari nestoechiometrici de wolfram respectiv vanadiu cu
metale monovalente. «Studii și cercetări chim. Acad.
RPR», 1965, 13, № 6, 595—608 (рум.)

Обзор. Библ. 64 назв.

2.1966. 12

Окислы

1965

4 Б480. Дислокации и их влияние на свойства тугоплавких окислов. Торопов Н. А., Удалов Ю. П.
«Ж. Всес. хим. о-ва им. Д. И. Менделеева», 1965, 10,
№ 5, 497—506

Обзор. Библ. 144 назв.

Обзор

X. 1966. 4

0-
Оксиды

ДМ ад

Х. 1966. 16

16 Б532. Высокотемпературная калориметрия жидких окисных систем. II. Энтальпии растворения окислов типа MO в пятиокиси ванадия. Yokoкаwa T., Клерра О. J. High-temperature calorimetry in liquid oxide systems. II. The enthalpies of solution of oxides of type MO in vanadium (V) oxide. «Inorgan. Chem.», 1965, 4, № 12, 1806—1808 (англ.)

Измерены энтальпии р-рения десяти различных окислов в расплавленной V_2O_5 при $685 \pm 5^\circ$. Энтальпии образования одного моля р-ра в пределах ошибок эксперимента линейно зависят от мольной доли р-ряемого окисла. Во всех случаях, кроме BeO и CuO, энтальпии р-рения отрицательны и возрастают в ряду $CuO-BeO < ZnO < CoO < MgO < NiO < CdO < PbO < CaO < SrO < BaO$. Это соответствует росту ионных радиусов катионов и основности р-ряемого окисла. Результаты обсуждаются, исходя из кислотно-основного характера процесса р-рения, рассматриваемого в терминах Лукаса — Флуда. Сообщ. I см. РЖХим, 1965, 12Б466. А. Гузей

1965

О-окислы

1966

14 Б25. Разложение окислов металлов в радиочастотной плазме аргона. Международный симпозиум по динамике химических реакций. Падуя, 1966. Borgianni C., Gramagosa F., Molinari E., Triolo L. The decomposition of metallic oxides in an argon radio frequency plasma. «(Preprint). Sympos. internat. dinam. reazioni chim., Padova, 1966», № 111—6, 6 pp., ill. (англ.)

X. 1964. 14

1966

Lattice parameters of nine oxides and sulfides as a function of pressure. R. L. Clendenen and H. G. Drickamer (Univ. of Illinois, Urbana). *J. Chem. Phys.* 44(11), 4223-8(1966)(Eng). The lattice parameters of 7 oxides and 2 sulfides were measured as a function of pressure to several hundred kilobars. FeO, CoO, NiO, MnO, and MnS have the NaCl structure or slight distortions thereof. The data can be fit by a Born-Mayer equation. For FeO, CoO, and NiO the crystal-field stabilization term contributes 5 to 15% of the total attractive pressure. FeS₂ (pyrite) has a cubic structure which can be related to the face-centered cubic lattice. Its compressibility is much less than MnS and more comparable to the oxides. The binding is apparently covalent. SnO₂, MnO₂, and TiO₂ all have the same tetragonal structure. For SnO₂ and MnO₂ the *c* axis actually expands with increasing pressure at low pressure, then passes through a max. and ultimately contracts. The compressibilities of these 2 compds. are low at low pressure and increase at pressures beyond the max. in *c*. TiO₂ behaves more normally. It is apparent that central forces, and therefore ionic binding, contribute little to the cohesion of these crystals. RCJQ

(overall)

FeO CoO
 NiO MnO,
 SnO₂, MnO₂
 TiO₂

C.A. 1966. 65.4
 4676 cd

(72)



1966

Handbook of physical constants. Melting and transformation points in oxide and silicate systems at low pressure. F. C. Kracek and Sydney P. Clark, Jr. (Yale Univ.). *Geol. Soc. Am., Mem. No. 97*, 301-22(1966)(Eng). A review with 80 references.

Michael Fleischer

Закрасить
но мембры

T_m ,
 T_{tr}

C.A. 1966. 65.4
4713 g

Физ. реп

Малышев С. В., Канюков 1966

Тем. стаб.
окислов
физ. реп.

88862d Changes in thermal properties of transition-metal oxides. Ya. S. Malakhov and G. V. Samsonov. *Izv. Akad. Nauk SSSR, Neorg. Mater.* 2(12), 2162-7(1966)(Russ). The literature data were scanned with respect to the m.p. and the thermal stability of transition metal oxides (at various stages of oxidn.) and compared to the characteristics in the electronic structure of transition metals and of O. The m.p. and the thermal stability of the oxides are detd. by the distribution of the valence electrons in the components into localized and non-localized electrons, and by the probability of formation of stable electronic configurations by the transition metal and O atoms. The lowering in the statistical wt. of stable configurations and the increase in the portion of nonlocalized electrons produce a lowering of the m.p. and a decrease in thermal stability of these oxides.

S. A. Mersol

C. A. 1967. 66. 20

О
окислы

1966

13 М58. О прочности керамики из чистых окислов.
Матвеев М. А., Матвеев Г. М., Хари-
тонов Ф. Я. «Изв. АН СССР. Неорган. материалы»,
1966, 2, № 2, 395—402

Рассмотрена прочность окисных керамич. материалов
с точки зрения их энергоемкости. Показано, что наи-
большей прочностью обладают окислы с макс. ее зна-
чениями. Библ. 22 назв. Резюме авторов

х. 1966. 13 лл

OKU

1966

The passivity of metals. K. Schwabe (Univ. Dresden, Ger.).
Angew. Chem., Intern. Ed. Engl. 5(2), 185-97(1966)(Eng).
Values of free energy (ΔG_{298}) for the formation of the oxide are
given for Ag, Al, Au, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, Ta,
Th, Ti, V, W, Zn, and Zr. 104 references. F. G. Norris

ΔG_f

C.A. 1966. 64. 11

15525bc

О-окислы
карбиды

1966

5 Б468. Фазовые и структурные особенности кубических окислов и карбидов переходных металлов IV и V групп и их связь с электронным строением. Цхай В. А., Гельд П. В. «Тр. ин-т химии. Уральский фил. АН СССР», 1966, вып. 9, 3—8

Близость св-в окислов, карбидов и нитридов переходных металлов позволяет рассмотреть их в единой валентной схеме: атом неметалла характеризуется заполненными $2s$ и $2p$ -оболочками, электроны связей $M-M$ отличаются более высокими энергетич. уровнями, чем связи $M-X$. Это может вызвать возникновение вакансий в неметаллич. подрешетке с соотв-щим увеличением числа электронов связей $M-M$, проходящих через вакансию, за счет тех электронов, к-рые до этого осуществляли связь с атомом неметалла. Связи $M-M$,

х. 1967.5

проходящие между атомами X, названы экранированными, а между атомом X и вакансией — неэкранированными. Эффект экранирования зависит от вытянутости d -орбит в направлении связи M—M, от протяженности 2 s - и 2 p -орбит и от числа электронов связи M—M. Учет экранированной связи M—M позволяет значительно полнее описать зависимость нек-рых физ.-хим. св-в соединений MX от электронной структуры.

Р. Софронова

1966

0-

Описаны

23 Б606. О расчете термодинамических функций окисных систем. Журавлева М. Г., Мень А. Н., Чуфаров Г. И. «Ж. физ. химии», 1966, 40, № 10, 2602—2603

Дискуссионная статья к реф. РЖХим, 1966, 10Б577.

Х. 1967. 23

Окислы, сульфиды

(D°)

No 33438

1967

(A-1246
успешно)

Drowart J., Pattoret A, Smoes S.

6.- Mass Spectrometric Studies of the
Vaporization of Refractory Compounds

// Proc. Brit. Ceram. Soc. - 1967, No 8.-
P. 67 - 89.

(Гусаров) ;

A-947

5, 6, 9, 10, 11, 12, 13, 14 вып.

20 монооксилов
18 моногторидов $(K_p = \frac{g^{\circ} - H^{\circ}}{T})$

Годнев И.Н., Алешонкова Ю.А.,

Теморизика Вып. Тамм, 1967, 5, №2,

272-277

M (10)

1967

A - 1097

Двойные окислы металлов (ДФ)
Обзор.

Goto K., Matsushita Y.,

J. Electrochem. Soc. Jap.

Overseas Ed.,

1967, 25(1), 1-7

Onuma
Kapur

[Bq - A - 1097]

1967

54
0820p

(H)

90437d The application of oxygen concentration cells with ZrO_2 -CaO solid electrolyte to thermodynamic and kinetic studies at high temperature. Kazuhiro Goto and Yukio Matsushita (Tokyo Inst. Technol., Tokyo). *J. Electrochem. Soc. Jap., Overseas Ed.* 35(1), 1-7(1967)(Eng). A review and discussion on standard free energy of formation of metal oxides, carbides, and interoxide compds.; chem. activity of the components in liq. or solid solns. of alloys and oxide slags; O pressure in gas mixts. at high temps.; rates of oxidn., redn., and deoxidn. in liq. metals; the amt. of O dissolved in liq. metals and alloys; and the change of O pressure in waste gas from steelmaking furnaces. 22 references. DHJN

C.A. 1968. 68.20



1967

Оксиды

термодинамика

19 Б793. Термодинамика нестехиометрических систем из оксидов. Roberts L. E. J., Markin T. L. Thermodynamics of ~~non-stoichiometric oxide system~~. «Proc. Brit. Ceram. Soc.», 1967, № 8, 201—217 (англ.)

Системы из оксидов, имеющих структуру флюорита, имеют при высоких т-рах большие области существования нестехиометрич. фаз: разупорядочение существует преимущественно в анионной подрешетке и связано с появлением кислорода в междоузлиях и образованием вакансий. Эти дефекты упорядочиваются при низких т-рах и дают сложные сверхструктуры. В областях гомогенности существуют домены, обладающие структурой ближайшей упорядоченной фазы, причем дальний поря-

X. 1968. 19

дэк нарушается. Термодинамич. данные согласуются с этой точкой зрения. Сравниваются термодинамич. данные для тв. р-ров $(U, Th)O_{2+x}$ и $(U, Pu)O_{2-x}$ и бинарных систем UO_{2+x} и PuO_{2-x} ; величины энтальпии существенно изменяются при таком разбавлении катионов переменной валентности инертными катионами, при к-ром не могут существовать локальные конфигурации, образующиеся в двойных системах. Вблизи стехиометрич. состава могут происходить быстрые изменения термодинамич. св-в, если образуются два типа дефектов с весьма различными энергиями образования.

Резюме

О-соед
Окислы

1967

1 В33. Роль диссоциации окислов в процессах взаимодействия их с углеродом. Рябчиков И. В. «Ж. физ. химии», 1967, 41, № 6, 1349—1351

Установлено, что при низких и достаточно высоких т-рах в основе химизма взаимодействия многих окислов с углеродом лежат тесно связанные между собой реакции диссоциации окисла и окисления восстановителя. Важную роль в процессе играет атомарный кислород. Резюме

Равновесие

с
углеродом

ж. 1968. 1

1967

30785b A thermodynamic treatment for oxidation of metals to nonstoichiometric oxides. Seiyama, T.; Takeyama, N. (Kyushu Univ., Fukuoka, Japan). *Metallurgie (Mons, Belg.)* 1967, 7(4), 161-8 (Eng). A thermodynamic treatment is given for the change in free energy in the oxidn. of metals. Values of ΔG are evaluated for stoichiometric and nonstoichiometric oxides in the systems Fe-O, Ti-O, V-O, U-O, Mn-O, Pb-O, and Cr-O. These values show an empirical trend when plotted vs. the ratio (moles of O/moles of metal), which results in a continuous curve at a const. temp. The results are explained by statistical thermodynamics, and an example of their application is given for VO_x . 14 references.

A. E. Morris

C.A. 1968. 69. 8

Финн 1/834

U

1967

0-

Окислы

19 Б791. Термодинамика окисления металлов до нестехиометрических окислов. Seiyama T., Takeyama N. A thermodynamic treatment for oxidation of metals to non — stoichiometric oxides. «Metallurgie» (Begl.), 1967, 7, № 4, 161—168, VI (англ.; рез. франц., флам.)

По литературным данным построены графики зависимости ΔG (обр.) от x в MO_x , где $M = Fe, Ti, V, U, Mn, Pb, Cr$. ΔG (обр.) систем $Fe - O$ и $Ti - O$ линейно уменьшается с увеличением x при низких T -рах. Небольшая кривизна наблюдается при высоких T -рах в области больших x . Кривые $\Delta G = f(x)$ систем $Mn - O, Cr - O, Pb - O$ при высоких T имеют минимум. Слабая кривизна зависимости $\Delta G = f(x)$ по всей области составов в интервале $298 - 1500^\circ K$ наблюдается для систем $V - O, U - O$. Предполагается, что кривые $\Delta G = f(x)$ непрерывны. Это

ж. 1968. 19

позволяет оценить неизвестные значения ΔG нестехиометрич. окислов. В кач-ве примера приведены термодинамич. расчеты и объяснение на основании их каталитич. окисления SO_2 . $\Delta G(\text{O}_2)$ для нестехиометрич. V_2O_5-d_x , являющейся катализатором, определена из наклона кривой $\Delta G=f(x)$ в точке V_2O_5 и использована для расчетов. Приводится статистико-термодинамич. анализ систем, в к-рых образуется ряд окислов MO_i , MO_j , MO_k и т. д. Использована модель, предложенная Ризом для системы $\text{Zr}-\text{H}$ (A. L. G. Rees, «Chemistry of the Defect Solid State», 1954, p. 48. London). Сделан вывод, что при T выше критич. переход от MO_i к MO_j и т. д. осуществляется непрерывно, что приводит к непрерывному изменению ΔG с изменением x . И. А. Васильева

Окислы

13 Б800. Термодинамические свойства окисных систем. II. Определение термодинамических свойств окислов методом э. д. с. в случае смешанной проводимости твердого электролита. Вечер А. А., Вечер Д. В. «Ж. физ. химии», 1967, 41, № 6, 1288—1293

Рассмотрен вопрос о применимости тв. электролитов, в частности, кислородно-анионных, для термодинамич. исследований методом э. д. с. Определены условия эксперимента, при к-рых электронной проводимостью электролита можно пренебречь. Показано, что при вычислении термодинамич. э. д. с. из измеренной необходимо знать не истинное, а среднее ионное число переноса электролита при соответствующих условиях. Исходя из этого рассчитан нижний предел применимости по кислороду для тв.

Х. 1968. 13

электролита $0,85 \text{ ZrO}_2 \cdot 0,15 \text{ CaO}$, когда нет необходимости вводить поправку на электронную проводимость. Предложены методы исследования, позволяющие вводить поправку на электронную проводимость тв. электролита, если последняя достаточно велика в условиях эксперимента. Показано, что нужно ввести понятие о естественной границе применимости тв. электролитов для термодинамич. исследований — того давления кислорода над изучаемым электродом, ниже которого э. д. с. гальванич. элемента перестает от него зависеть. Сообщ. I см. РЖхим, 1966, 10Б577. Автореферат

1967

Окислы

обзор

1 Б515. Расчет приведенных термодинамических потенциалов некоторых окислов. Войтович Р. Ф., Головко Э. И. «Ж. физ. химии», 1967, 41, № 2, 489—491

Из литературных данных рассчитаны приведенные термодинамич. потенциалы 28 окислов при t -рах 298, 500, 1000, 1500 и 2000° К. Полученные величины дополняют имеющиеся таблицы приведенных термодинамич. потенциалов соединений в конденсированном и газообразном состояниях.

Автореферат

х. 1968.1

1987

Okunov
y. Pavlov
Teplov
Ch. - b. a.

108966w Calculation of reduced thermodynamic potentials of some oxides. R. F. Voitovich and E. I. Golovko (Inst. Inzh. Morsk. Flota, Odessa). *Zh. Fiz. Khim.* 41(2), 489-91(1967) (Russ). The derived thermodynamic potentials ϕ_r , of 28 oxides were calcd. and are tabulated for 298, 500, 1000, 1500, and 2000°K. GBJR

C.A. 1987 66.24

1968

ОкислыТермодинамикаОкислов

Д. г. С.

54938e) Thermodynamic properties of the oxides of iron, nickel, lead, copper, and manganese, by emf. measurements. Charette, G. G.; Flengas, S. N. (Univ. Toronto, Toronto, Ont.). *J. Electrochem. Soc.* 1968, 115(8), 796-804 (Eng). A "closed system" solid electrolyte electrochem. cell has been designed to investigate the thermodynamic properties of metal oxides. The measurements with this cell are free of mixed potentials arising from nonequil. O pressure conditions in the electrode compartments. The oxide systems investigated include Ni-NiO, Pb-PbO_(S,L), Cu-Cu₂O, Cu₂O-CuO, Fe-Fe₂O, Fe₂O-Fe₃O₄, Fe₃O₄-Fe₂O₃, MnO-Mn₃O₄, and Mn₃O₄-Mn₂O₃. 66 references.

RCIV

C.A. 1968-69. 14

Окисел

1968

Schick H. L.

Лзкр,
т. 9. 89ас.

Perforem. High Temperat.
Syst. Vol 1,
New - York, London - Paris,
1968, 9.

(Сел. 89асел) I

1968

0-
Оксиды
переходных
металлов

4 Б619. Концентрационные зависимости средних атомных объемов окислов переходных металлов IVa—Va подгрупп. Швейкин Г. П., Гельд П. В., Алямовский С. И., Цхай В. А. «Ж. физ. химии», 1968, 42, № 9, 2178—2183

Показано, что конц-ионные зависимости ср. атомных объемов для окислов переходных металлов IVa и Va подгрупп могут быть аппроксимированы двумя прямыми участками. Это обусловлено тем, что механизм образования низших окислов и тв. р-ров кислорода в рассматриваемых металлах, с одной стороны, и высших окислов — с другой, качественно различен. Если для первых характерно последовательное заполнение октаэдрич. пустот металлч. подрешетки, то для последних своеобразной основой служит легко деформируемый кислородный каркас.

Автореферат

X. 1969.4

Окислы

ЗНОВский В.К.

1968

Выращивание монокристаллов
высокотемпературных окислов.
(обзор, очень хороший)

Ж.ВХО им Д.И. Менделеева,
1968г., №2, стр. 134 — 142

1969

Окислы
металлов

35546a High-temperature chemistry of simple metallic oxides. Alcock, Charles B. (Imp. Coll., London, Engl.). *Chem. Brit.* 1969, 5(5), 216-23 (Eng). The high-temp. chemistry of simple metallic oxides is reviewed in terms of the thermodynamics of the oxides, defects and nonstoichiometry in oxides, diffusion of ions and electrons, the effects of nonstoichiometry on diffusion, and the vaporization of metallic oxides. 28 references. CJJN

термодинам.

материал

С.А. 1969. 71. 8

Описи
металлов

Вар 5090-X

1969

Арум С. С.

Соглас. переим. состава,
1969, 262-328, Изд. "Ленин"
Ленинград.

1969

Окислы

переходн.
металлов

16 Б1052. Физико-химические и каталитические свойства окислов переходных металлов. Bielański Adam, Deren Jerzy, Haber Jerzy. Physico-chemical and catalytic properties of transition metal oxides. «Zesz. nauk. Akad. górń.-hutn.», 1969, № 247, 129—157 (англ.; рез. польск.)

Обзор и обсуждение работ авторов. Библ. 63

Обзор

X. 1970. 16

Okecece

1969

93851c Dissociation energies and free energy functions of gaseous monoxides. Brewer, Leo, Rosenblatt, Gerd M. (Lawrence Radiat. Lab., Univ. of California, Berkeley, Calif.). *Advan. High Temp. Chem.* 1969, 2, 1-83 (Eng). A review, with 386 refs. Rotational and vibrational consts. of diat. oxides, electronic energy levels and degeneracies used in the gaseous oxide, free energy function calcns., heats of atomization of the elements at 298.15°K, dissocn. energies of gaseous diat. oxides, heats of formation of gaseous and condensed oxides (some are not diat.), and free energy functions are tabulated for gaseous diat. oxides. The sources and the evaluation of the data are discussed at length.

GXJN

Do

AG

(обзор)

C.A. 1970. 72.18

1969

Нестехиометр.

Окислы

мет. ч. сб. 66

19181p / Thermodynamic properties of nonstoichiometric oxides. Lykasov, A. A.; Kuznetsov, Yu. S.; Pil'ko, E. I. (USSR). *Tr., Chelyabinsk. Politekh. Inst.* 1969, No. 53, 7-13 (Russ). Two apps. were proposed for studying the thermodynamic properties of nonstoichiometric oxides by means of emf. measurements on galvanic cell of the type $Pt|M_I, M_I O|electrolyte|M_{II}, = M_{II} O|Pt$, where $M_I O$ is a studied oxide, $M_{II} O$ an oxide with known thermodynamic properties and the intermediate electrolyte is a pure O ion conductor. Both described apps. were essentially modifications of ones which had been described previously and differed only in the heater and elec. devices. Both apps. were applied for the detn. of the thermodynamic properties of weistite by measuring emf. across solid electrolytic cell $Pt|Fe, FeO|ZrO_2 + CaO|FeO_{1+x}|Pt$. The data calcd. from these measurements were in good agreement with the literary values for both apps. New data for low temp. region are given.

Jan J. Linek

C.A. 1970. 73-4

1969

118317g Role of d electrons in the refractory nature of metal oxides. Suchet, Jacques P. (Lab. Magn. Phys. Solid, C.N.R.S., Bellevue-Meudon, Fr.). *C. R. Acad. Sci., Paris, Ser. C* 1969, 268(10), 891-4 (Fr). The refractory nature of rare earths and transition metals oxides is max. for certain values of the no. of d or f electrons per atom, corresponding to the filling in of energy sublevels. Relative max. are discussed for Cr_2O_3 (d^3), MnO (d^5), Fe_2O_3 (d^5), NiO (d^8), and Gd_2O_3 (f^7). E. Grunhut

Tyronalab

окна

металл

C.A. 1969. 70.26

Окислы

1970

10 Б593. Диаграммы состояния неметаллических систем. Окислы металлических элементов и кремния. 1968. Вып. 5. Агеева Д. Л., Шведов Л. В. (ВИНИТИ АН СССР. Итоги науки). М., 1970, 200 с., илл., 99 к.

X. 1971. 10



1970-

Ducro

103867m Forms of gaseous oxides. Dobrotin, R. B.; Rat'kovskii, I. A. (USSR). *Dissotsiiruyushch. Gazy Teplonositeli Rab. Tela Energ.* 1970, 190-4 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1971, Abstr. No. 8B666. An attempt is made to find the criterion for the formation of polymeric and monomeric oxide forms in the gaseous state. The criterion (Δ) is the difference in the binding energy of R-O in solid oxides and gaseous monoxides (RO) and serves as an approx. measure of the capacity of elements to form multiple bonds.

C.A. 1972. 76. 18

Воинские
описки

1970

Kubaschewski O.

отпуск 16/19

КС, report 7
1970, 1-30

"A Station of the Report."

Окислы

1970

9 Б525 К. Свойства окислов и близких к ним соединений. Часть 8. Landolt-Börnstein. Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik. Neue Ser. Hrsg. Hellwege K.-H. Gruppe III: Kristall- und Festkörperphysik. Bd 4. Magnetische und andere Eigenschaften von Oxiden und verwandten Verbindungen. Teil b. Bonnenberg D., Boyd E. L., Calhoun B. A., Folen V. J., Gräper W., Greifer A. P., Kriessman C. J., Lefever R. A., McGuire T. R., Paulus M., Stauss G. H., Vautier R., Wijn H. P. J. Berlin—Heidelberg—New York, Springer, 1970, xvi, 666 S., ill. (англ. и нем.)

X. 1971.9

Oxide

1970

(103893a) Calculation of the dissociation entropy for oxides and chlorides of the $M_xO_{y+2} \rightarrow M_xO_y + O_2$ and $MCl_{x+2} \rightarrow MCl_x + Cl_2$ type [where M = metal]. Taloi, D. (Inst. Politeh. "Gh. Gheorgiu-Dej," Bucharest, Rom.). *Metalurgia (Bucharest)* 1970, 22(10), 633-7 (Rom). Statistical anal. of the data on the std. dissocn. entropy (ΔS_0) of a large variety of title compds., suggested a statistical distribution of the data around an av. ΔS_0 value. Thus, for oxides, the av. value is 45 cal/g-atom-degree, and the distribution of the ΔS_0 data on 48 oxides follows the normal frequency curve. Similarly for chlorides, the av. value is 34.75 cal/g-atom-degree, and the data on 50 compds. confirm the normal distribution.

G. Auslaender

5.5 que

(+1)

C.A. 1971. 74. 20



Оксиды
переходн.
металлов

1971

19 Б1121. Физические свойства и каталитическая активность окислов переходных металлов. Carra S. Physical properties and catalytic behaviour of transition metal oxides. «Chim. e ind.» (Ital.), 1971, 53, № 4, 366—381 (англ.)

Обзор. Библ. 56.

сущ.

св-ва

X. 1971. 19

Оксиды

1971

20 ВЗ. О нестехиометрии окислов при высоких температурах. Третьяков Ю. Д. В сб. «Физ. химия окислов». М., «Наука», 1971, 141—151

Обзор. Библ. 56



X. 1971. 23

Окислы

1971

20 Б631. К. Физическая химия окислов. Сборник издан в связи с 70-летием чл.-кор. АН СССР Т. И. Чуфарова. (АН СССР. Уральск. науч. центр. Ин-т металлургии). М., «Наука», 1971. 190 с., ил., 1 руб. 7 коп.

X.1971.20

Обзор, двойные окислы.

1972

✓ 6 Б718. Термодинамические свойства двойных окис-
лов. Обзор. Kubaschewski O. The thermodynamic
properties of double oxides (a review). «High Temp.-High
Pressur.», 1972, 4, № 1, 1—12 (англ.)

Обзор по термодинамич. св-вам двойных окислов.
Приведены значения теплот образования, станд. энтро-
пий, теплоемкостей и изменения энергии Гиббса при об-
разовании двойных окислов из простых. Для определе-
ния этих термодинамич. св-в применены калориметрич.
методы, метод э. д. с и изучение равновесия в газовой
фазе. Библ. 103.

В. К. Камышова

Х. 1973. № 6

открыт 2161

Двойные окислы

1972

(4 Hf, Cp.)

(S, 4 Gf)

8584z Thermodynamic properties of double oxides. Kubaschewski, O. (Div. Chem. Stand., Natl. Phys. Lab., Teddington/Middlesex, Engl.). *High Temp.-High Pressures* 1972, 4(1), 1-12 (Eng). A review with 103 refs., on the thermodynamic data for double metal oxides, includes discussion of: heats of formation, std. entropies, m.ps., heat capacities, and Gibbs free energies of formation.

C. A. 1973, 78. N2.

Оммуек 2161

1872

22 Б685. Некоторые закономерности в термодинамических свойствах силикатов, титанатов, алюминатов и хромитов железа и кобальта. Левницкий В. А.
«Ж. физ. химии», 1972, 46, № 6, 1554—1555

Обращено внимание на то, что способность к восстановлению сложных окисных соединений Fe и Co уменьшается в ряду $M_2SiO_4 - MTiO_3 - MAl_2O_4 - MCr_2O_4$ ($M = Fe, Co$), хотя устойчивость двойных окислов изменяется иначе. Предположено, что причиной этого являются электронные взаимодействия, обусловленные расщеплением d -орбиталей в поле лигандов. П. М. Чукуров

Х. 1872. 22

фазовые диаграммы

1972

металл — кислород

14 B871. Бинарные равновесные фазовые диаграммы металл — кислород и кристаллографические данные. Rajput B. K., George A. M., Karkhana-vala M. D. Binary metal—oxygen phase equilibrium diagrams and crystallographic data. «Govt India Atom. Energy Commis.» [Rept], 1972, № 653; 106 pp., ill. (англ.)

Обзор. Приведены сведения о равновесных фазовых диаграммах металл — кислород для 34 переходных металлов, а также представлены все известные кристаллографич. данные по бинарным окисным фазам, охарактеризованным в приведенных системах.

А. В. Салов

Х. 1974. N14

1972

22 Б672. Твердые электролиты с Р-ионной проводимостью в термодинамических исследованиях окисных соединений, сплавов, карбидов, боридов и фторидов химически активных металлов. Резухина Т. Н. «Ж. физ. химии», 1972, 46, № 6, 1565—1567

Рассмотрено использование метода э. д. с. ячеек с тв. электролитом для определения термодинамич. св-в окислов, фторидов, карбидов и т. п. Сделан вывод, что наиболее эффективны ячейки с фторидами щел.-зем. металлов в кач-ве электролита. П. М. Чукуров

X. 1972. 22

Оксиды
переходных металлов

1972

4Hf

70780j Heats of formation of oxide and silicate solid solutions, one of the components of which is a transition metal compound. Urusov, V. S. (USSR). *Elektron. Str. Fiz. Svoistva Tverd. Tela* 1972, No. 2, 36-43 (Russ). From *Ref. Zh., Khim.* 1973, Abstr. No. 5B680. On the basis of previously published data concerning the model of formation of ionic equivalent solid solns., the heat of formation of the solid solns. (one of the components of which was a transition metal compd.) was calcd. The heat of formation of the oxide and silicate solid solns. were calcd. and the results were compared with the literature data. The examd. solid solns. have low heats of formation (from 0.06 to 0.7 kcal/mole).

C. A. 1973. N12, 79.

Библ. информ.

Окислы

1973

1) 2 Б863 К. Диаграммы состояния неметаллических систем. Т. 8. Окислы металлических элементов и кремния. Агеева Д. Л., Шведов Л. В., Шаплыгин И. С. (Итоги науки и техн. ВИНТИ АН СССР). М., 1973. 155 с., ил., 1 р. 5к.

х. 1974

№2

- 2) 10 E576. Экспериментальное исследование термодинамических свойств тугоплавких веществ при высоких температурах. Bondarenko V. P., Fomichev E. N., Kandyba V. V. Experimental study of the thermodynamic properties of refractories at high temperatures. «High Temp.-High Pressur.», 1973, 5, № 1, 5—7 (англ.)

(ΔH_{298}°)
Дана сводка результатов измерений энтальпии элементов, оксидов, карбидов и силцидов в форме таблицы коэф. ф-лы $\Delta H_{298.15}^{\circ} = aT + bT^2 + cT^{-1} + d$. Обсуждаются закономерности изменения энтальпии в рядах дисилицидов переходных металлов.

(72) ☒

Душементы, окислы
карбиды, силициды.

1973

($H_T - H_{298}$)

30559d Thermo dynamic properties of refractories at high temperatures. Bondarenko, V. P.; Fomichev, E. N.; Kandyba, V. V. (Kharkov State Inst. Metrol., Kharkov, USSR). *High Temp. - High Pressures* 1973, 5(1), 5-7 (Eng). The results of experimental enthalpy detns. for a range of elements, oxides, carbides, and silicides at high temps. are tabulated in the form of coeffs. of a fitted polynomial for enthalpy relative to 298.15°K, $H_T - H_{298.5} = aT + bT^2 + cT^{-1} + d$. The results for transition metal disilicides are interpreted in terms of the acceptor characteristics of transition metal atoms.

C.A. 1974. 81. N4

72 X

Окислы

1973

22 Б603. Соотношение между энергией связи и энтальпией образования у полупроводниковых окислов. Dereń Jerzy, Jarzębski Zdzisław M., Rusiecki Sławomir. Relacja między przerwą energetyczną w tlenkach a entalpią ich tworzenia. «Zesz. nauk. AGH», 1973, № 329, 25—27 (польск.; рез. англ.)
Рассмотрены имеющиеся в лит-ре данные об энергии связи E_g и энтальпии образования $\Delta H(\text{обр.})$ для 41 окисла. Показано, что предложенные ранее соотношения типа $E_g = n\Delta H(\text{обр.})$ ($n = \text{const}$) описывают связь между величинами E_g и $\Delta H(\text{обр.})$ недостаточно хорошо.
М. В. Коробов

Х. 1973 № 22

Окислы

1973

7 E897. Приближенные расчеты изменений энтропии и энтальпии композиций окислов при повышенных температурах. Горбунов Л. В. «Ж. физ. химии», 1973, 47, № 2, 454—455

Предложены значения инкрементов для приближенных расчетов $S_T - S_{298}$ и $H_T - H_{298}$ композиций окислов при t -рах до 1400°K .

Автореферат

Ф. 1973. № 7

Оксиды

1973

-) 12 Б687. Приближенные расчеты изменений энтропии и энтальпии композиций окислов при повышенных температурах. Горбунов Л. В. «Ж. физ. химии», 1973, 47, № 2, 454—455

Предложены значения инкрементов для приближенных расчетов $S_T - S_{298}$ и $H_T - H_{298}$ слоистых окислов при t -рах до 1400°K . Резюме

Х. 1973 N 12

1973

Оксиды

Кинетика
восстановл.

Б1056. Кинетика и механизм восстановления оксидов металлов. Kurcator M. S. Kinetik und Reduktionsmechanismen von Metalloxiden. «Festkörperchemie. Beitr. Forsch. und Prax.» Leipzig, 1973, 268—286 (нем.)

Обзор. Рассмотрено влияние условий на механизм восстановления и наиболее детально — работы автора по бесконтактному восстановлению. Библ. 62. Э. Раков

х. 1974 №11

Зак. 247

Кинетика восстановления 1973

Описи

11 Б1055. Кинетика восстановления окислов металлов. Lambiev D. K. Thermische Kinetik der Reduktion von Metalloxiden. «Festkörperchemie. Beitr. Forsch. und Prax.» Leipzig, 1973, 287—306 (нем.)

Обзор экзотермич. и эндотермич. р-ций восстановления окислов газами и тв. С. Библ. 43. Э. Раков

Х. 1974 № 11

31231.8447

Ch. TE

39490

1973

4-2896

- Liquid oxides.

"Diffus. Data", 1973, 7, N 4, 585-586

(англ.)

0013 ммк

1012 1022 0 0 6

ВНИИТИ

Окислы

1973

$\Delta H_m; \Delta H_{\text{tr}}$

ΔH_{mix}

35783r Measurement of thermochemical values in oxide systems by inductive microcalorimetry. Mueller, Franz (Inst. Gesteinshuettenkd., Rheinisch-Westfael. Tech. Hochsch. Aachen, Aachen, Ger.). *Ber. Deut. Keram. Ges.* 1973, 50(4), 107-11 (Ger). The method of inductive microcalorimetry was improved by a crucible positioned in a receiver at 5×10^{-6} torr, exact elec. recording of the measuring values, and by elec. differentiation. The efficiency of the method was demonstrated by measuring the heats of melting, transition, and mixing of oxides.

C.A. 1973. 79 N6



метод из-д
микрокалорим.

31231.8456

TE

Okucell

39490

1973

is-2865

- Oxides.

"Diffus. Data", 1973, 7, N 4, 627-628
(англ.)

0013 чик

1012 1022 0 0 6

ВИНИТИ

Восстановление

1978

окислов переходящих

металлов алюминия.

161026w Thermodynamics of reduction of transition metal oxides with aluminum. Podergin, V. A.; Korchagin, M. A. (USSR). *Teoriya i tekhnol. metalloterm. protsessov* 1973, 102-13 (Russ). From *Ref. Zh., Metall.* 1974, Abstr. No. 7A110. Title only translated.

C. A. 1975, 22 v 24

31231.844.6

Ch. TE

39490

1973

4-2895

Solid oxides.

"Diffus. Data", 1973, 7, N 4, 572-585
(АНТИ.)

I

0013 0000

1012 1022 0 0 6

ВИНИТИ

Окислы

Spencer, P. J.

1973.

таблицы

" Nat. Phys. Lab. (U.K.);
Div. Chem. Stand. Rep."

T_m ; ΔH_f ;
 S° ; C_p ;

1973, N21, 36 pp.

● (см. Силекаты; I)

Оксиды неметаллов
(теплофизика)

1973

87728s Thermophysical Properties of Nonmetallic Materials. (Oxides). Reference Book. (Teplofizicheskie Svoistva Nemetallicheskikh Materialov. (Okisly). Spravchnaya Kniga) Krzhizhanovskii, R. E.; Shtern, Z. Yu. (Energiya, Leningrad. Otd.: Leningrad, USSR). 1973. 333 pp. 1.45 r.

C.A. 1974. 80. N16

Окислы

1973

15 Б1092 К. Химия нестехиометрических оксидов.
Третьяков Ю. Д. М., Моск. ун-т, 1974. 364 с., ил.,
2 р. 78 к.

книга

В книге рассмотрены современные представления о природе нестехиометрич. дефектов в простых и сложных оксидах. Описаны методы и результаты исследований равновесных условий образования и представлений термодинамич. анализ процессов разупорядочения в системах металл—кислород, образованных 3d-, 4d-, 5d-элементами, s- и p-элементами, лантанидами, актинидами, а также в ферритах со структурой шиннели. Рассмотрено влияние нестехиометрии на кинетику и механизм диффузионных процессов, р-ций между кристаллами и газ. фазой, твердофазных р-ций и гетерогенного катализа, а также на электр.ч., диэлектр.ч., магнитные, теплофизич., механич. и оптич. св-ва оксидов и ферритов.

С. С. Плоткин

Х. 1974

№ 15

Окислы переход. мет.

1973

(ΔHf)

69324y Thermochemical hierarchies in some binary transition metal compounds as applied to the production of rare earth metals. Trombe, F.; Male, G. (Fr.). *Redkozemel. Metal., Splavy Soedin., Mater. Soveshch.*, 7th 1972 (Pub. 1973), 15-26 (Fr). Edited by Savitskii, E. M. "Nauka": Moscow, USSR. The enthalpy of formation for oxides and carbides is given from 0° to 200° and 0° to 2500°, resp. The prepn. of the rare earth dicarbides with subsequent displacement by a more active metal such as Ta to yield the pure rare earth metal is described. The technique is applicable for all the rare earth elements except the volatile Sm, Eu, and Yb.

R. F. Rolsten

С.А. 1974 81 №12

☒ (+1) Карбиды переход. мет.

Оксиды (обзор)

1973

7 E550. Фазовые превращения в окислах. Wang Franklin F. Y., Gupta Kedar P. Phase transformation in the oxides. «Met. Trans.», 1973, 4, № 12, 2767—2779 (англ.)

фазов.
превр.

Обзор. Рассмотрены основные типы фазовых превращений в окислах: 1) переходы типа смещения; 2) превращения типа порядок — беспорядок; 3) образование кластеров и разделение фаз в кристаллич. системах и в стеклах. Переходы типа смещения связаны с изменениями во второй координационной сфере без изменения координационного числа основного полиэдра. Они особенно характерны для сегнетоэлектрич. и антисегнетоэлектрич. окислов со структурой перовскита — BaTiO_3 , PbTiO_3 и т. п. Упорядочение в окислах проявляется различным образом. В сегнетоэлектриках типа KDP упорядочиваются атомы водорода; такие переходы

ф. 1974. № 7

можно отнести как к первому, так и ко второму роду. В феррошпинелях возможно перераспределение катионов между подрешетками (MgFe_2O_4), а также их упорядочение в пределах одной подрешетки (LiFe_5O_8). В двойных перовскитах (Ba_2CoWO_6) при упорядочении образуется слоистая структура. В окислах и окисных стеклах часто происходит расслоение, сопровождающееся кристаллизацией новых фаз. Такой распад имеет характер спинодального ($\text{TiO}_2\text{—SnO}_2$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{—Cr}_2\text{O}_3$, $\text{CoFe}_2\text{O}_4\text{—Co}_3\text{O}_4$) и иногда сопровождается образованием модулированных структур ($\text{Na}_2\text{O—SiO}_2$). Прослежены основные различия между фазовыми переходами в окислах и в металлах. Библ. 86.

Б. Г. Алапин

Окислы

1973

(обзор)

(T_{tr})

31138g Phase transformations in oxides. Wang, Franklin F. Y.; Gupta, Kedar P. (Mater. Sci. Dep., State Univ. New York, Stony Brook, N.Y.). *Met. Trans.* 1973, 4(12), 2767-79 (Eng). Phase transformations in oxides are reviewed with 86 refs. Topics discussed include: displacive phase transitions, order-disorder transitions, clustering, and pptn. Transitions inferroelec. and antiferroelec. oxides, lattice and dynamics are also discussed.

Nat L. Shepard

C.A. 1974. 80 N 6

[Деп. № 9]

1974

Δ H₊

(оценки)

Бурмев Б.П., Селемев
С.И.,

Рукопись деп. Визиты № 2899-
41 деп.

Стандартные
словарные



теплоты образов.
Окселов.

1974

1 Б1015. Процессы, происходящие при прокаливании металлов групп VIa и Va в кислороде, водяном паре и на воздухе при низких давлениях. J e h n H. Vorgänge beim Glühen von VIa- und Va-Metallen in Sauerstoff, Wasserdampf und Luft bei niedrigen Drücken. «Metall», 1974, 28, № 7, 699—705 (нем.)

Обзор. Рассмотрены р-ции, протекающие при термообработке W, Mo, Ta, Nb и Vb O₂, водяном паре, N₂ и на воздухе. Проведено сравнение потерь металла W и Mo с соотв-щими данными для Ta, Nb и V. Описан процесс поглощения O₂ для Ta, Nb и V в атмосфере водяного пара и проведено сопоставление этих данных с данными в атмосфере O₂. Установлено, что в случае Mo и W при т-ре >1300° адсорбция O₂ и испарение летучих окислов происходит с одинаковой скоростью, и благодаря постоянному испарению окислов имеют место

2. 1975. N1

повышенные потери металла. Для Nb и Ta при $t_{\text{ре}} > 1800^\circ$ устанавливается соответствующее стационарное состояние с большой потерей металла. В случае Nb и Ta, в противоположность Mo и V, значит. кол-ва кислорода могут быть р-рены в металле. Конц-ия р-ренного кислорода в стационарном состоянии зависит только от парц. давл. газа и $t_{\text{ры}}$. Отмечено, что потери металла во всех исследованных системах являются величинами одного порядка за исключением $W-O_2$ при $t_{\text{ре}} > 1700^\circ$ и $W-H_2O$. Указано, что при $t_{\text{ре}} < 1700^\circ$ для Nb и Ta имеет место чистое поглощение газа с образованием р-ра и окисла, а для Mo и при $t_{\text{ре}} < 1300^\circ$ прежде всего при немного повышенных давл. образуются также поверхн. окисные слон. Библ. 64. И. Ш. Гершензон

1974

Оксидные системы.

24 Б854. Масс-спектрометрическое исследование испарения и диссоциации в оксидных системах. Казе-нас Е. К., Чижигов Д. М., Цветков Ю. В. В сб. «Строение, свойства и применение металллов». М., «Наука», 1974, 158—163

На основе собственных и лит. данных проведена попытка систематизации процессов испарения оксидных систем в зависимости от положения их в периодич. системе элементов.

Резюме

Х. 1974. N24

Окислы

19.74

(P)

116177k Mass spectrometric study of vaporization and dissociation in oxide systems. Kazenas, E.; Chizhikov, D. M.; Tsvetkov, Yu. V. (USSR). *Str., Svoistva Primen. Metallid., [Mater. Simp.]*, 2nd 1972 (Pub. 1974), 158-62 (Russ). Edited by Kornilov, I. I.; Matveeva, N. M. "Nauka": Moscow, USSR. A review is given of the nature of transition of oxides into the gaseous phase during vaporization. It concerns metal oxides and also B, Si, P, and As oxides. 67 Refs.

④④ неперенес
окислов B, Si

С.А. 1975. 82. N18

☒ P, As.

Справочник

1974.

Rao C. N. R., et al.,

Оксиды переходных металлов.
Кристаллохимия, фазовые
переходы и родственные
аспекты.

Гос. служба станд. 1977, том. 2.)

Оксиды переходн. металлов 1974

(Tr)

J35100c Transition metal oxides. Crystal chemistry, phase transitions, and related aspects. Rao, C. N. R.; Rao, G. V. Subba (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., Kanpur, India). Natl. Stand. Ref. Data Ser., Natl. Bur. Stand. 1974, 49, 130 pp. (Eng). A review with numerous refs.

C. A. 1975, 22, 16

~~Onus~~ Ti, V, Fe, Zr, W, Re

1974

(0530p)

3042-v Transition-metal oxides. Rao, C. N. R. (Dep. Chem., Indian Inst. Technol., Kanpur, India). *Solid State* 1974, 455-563 (Eng). Edited by Rao, C. N. R. Dekker: New York, N.Y. A review with 560 refs. on Ti, V, Fe, Zr, W, Re oxides.

C.A. 1974. 8/1 v 26

Монография

1974

Окислы переходящих металлов

1979c National Standard Reference Data Series:
Transition Metal Oxides: Crystal Chemistry, Phase Transition,
and Related Aspects (NSRDS-NBS 49). Rao, C. N. R.; Rao,
G. V. Subba (GPO: Washington, D. C.). 1974. 130 pp. 1.70
dollars.

(Tr)

C.A. 1975 83 N2

Окислы металлов

1974

M_2O_3 , Карбиды металлов MC

103388a Statistical evaluation and analysis of the prediction of melting points of high-melting compounds. Savitskii, E. M.; Shelest, A. E.; Gribulya, V. B. (USSR). *Fiz.-Khim. Issled. Metall. Metalloved. Primen. EVM* 1974, 101-10 (Russ). Edited by Novikov, I. I.; Shelest, A. E. "Nauka": Moscow, USSR. Statistical treatment of a series of m.ps. of oxides (M_2O_3) and carbides (MC) showed that one can predict numerically the properties (such as the m.p.) of chem. compds. by a calcn. which involves the description of the components (isolated atoms) of these compds. by their electronic structure.

(T_m)

(+1) ☒

C.A. 1975. 83 N/2

1974

52847c Solubility and thermodynamic properties of oxygen in solid molybdenum. Srivastava, S. C.; Sengle, L. L. (Semi-Met., Inc., Westbury, N.Y.). *Metal. Trans.* 1974, 5(1), 49-52 (Eng). The O soly. in solid Mo at 1400-1900° was detd. by equilibrating zone-refined Mo rods with Mo-MoO₂ powders: $\ln x_0^{(O)}$ (atom fraction) = $5.85 - 27,900/T$. The chem. potential of O in the dil. solid soln. was calcd. by using the known ΔG for formation of

MoO₂: $\mu_0^a - 0.5 \mu_{O_2}^g = \Delta \bar{G}_0^a = -10,760 + (6.92 + R \ln x_0^a)T \pm 1000$ cal/g-atom O. The heat of soln. of O in solid Mo, $\Delta H_0^a = -10,760 \pm 3000$ cal/g-atom O, and the excess entropy for the interstitial solid soln., $\Delta S_0^a = -9.10 \pm 1.5$ cal/degree g-atom O, were calcd. by assuming that the O atoms reside in the octahedral interstices of bcc. Mo. Nat L. Shepard

($\Delta H_{\text{paerb.}}$
b Mo)

C.A. 1974. 80. N10

Оксиды переходн. металлов

1974

(Tm) 132290x Electrophysical properties of transition metal oxides. Tkachenko, I. G.; Fen, E. K. (USSR). *Str., Svoistva Pri-men. Metallid.*, [Mater. Simp.], 2nd 1972 (Pub. 1974), 141-4 (Russ). Edited by Kornilov, I. I.; Matveeva, N. M. "Nauka": Moscow, USSR. The m.ps. and elec. conductivities of a series of transition metal oxides showed that the thermal stability and elec. properties of these oxides depend on the probability of formation of stable electron configurations in the metal and O sublattices and the degree of their stability. The m.ps. depend mainly on the metal-O bond and the statistical wts. of the s^2p^6 configuration of O and the stable d configurations of the metal. The elec. cond. and the activation energy of current carriers are detd. by the metal-metal bonds, the statistical wts. of the stable d and sp configurations and the degree of their stabilization.

C. A. 1975. 82. N20

Октябрь
(22)

1975

T_m

137899h Calculation of the melting points of oxides.
Bobkova, O. S.; Voskoboinikov, V. G.; Kozin, A. I. (Tsentr.
Nauchno-Issled. Inst. Chern. Metall., Moscow, USSR). *Izv.
Vyssh. Uchebn. Zaved., Chern. Metall.* 1975, (5), 29-31 (Russ).
An equation was derived for calcg. m.ps. of metal oxides as
function of metal-O bond energy: The calcd. m. ps. for 22
oxides, for which the bond energy can be calcd. from published
thermodn. data, are in qual. agreement with the exptl. data.

C.A. 1975.83. N16

Оксиды, карбиды

1975

(ΔHf)

176036y Standard heats of formation of complex oxides. Burylev, B. P.; Smyshlyaev, S. I. (Krasnodar. Politekh. Inst., Krasnodar, USSR). Zh. Fiz. Khim. 1975, 49(1), 267 (Russ). Addnl. data considered in abstracting and indexing are available from a source cited in the original document. Standard heats of formation of ferrites, aluminates, and titanates of alkali metals were calcd. Comparison with silicates was carried out. Equations for calcg. heats of formation of Cr, Mn, Fe, Co, and Ni compds. were derived. Using these equations, heats of formation of compds. formed from oxides of Fe group and oxides of alkali metals or Al_2O_3 , Ga_2O_3 , and SiO_2 were calcd. A. Bekarkova

Соедин. зр. железа с оксидами Al_2O_3
 Ga_2O_3 и SiO_2 , ферритами, алюминатами
и титанатами щел. мет.

С. А. 1975. 82. № 6

(43) ☒

Оксиды переходн. металлов 1975

9 Б910. Определение отклонения от стехиометрии окислов переходных металлов на основе комплексных измерений диффузии. Fryt Ewa, Mrowiec Stanisław, Podgórecka Aleksandra. Wyznaczanie odstępstw od stechiometrii w tlenkach metali przejściowych na podstawie pomiarów współczynników dyfuzji. «Spraw. pos. komis. nauk. PAN Krakowie», 1974(1975), 18, № 1, 252—255 (польск.)

В развитие пред. работы (см. пред. реферат) показана возможность определения y в нестехиометрич. окислах $M_{1\pm y}O$ на основе измерений диффузии компонентов окисла при различных давл. O_2 . Результаты иллюстрируются графическими данными для окиси кобальта при 1000° .
А. Гузей

X 1976 №9

Оксиды переходн. металлов 1975

9 Б909 Отклонения окислов переходных металлов от стехиометрии. Fryt Ewa, Mrowiec Stanisław, Podgórska Aleksandra. Odstępstwa od składu stechiometrycznego w tlenkach metali przejściowych. «Spraw. pos. komis. nauk. PAN Krakowie», 1974(1975), 18, № 1, 251—252 (польск.)

Отклонение окислов переходных металлов от стехиометрии в зависимости от T -ры и давл. O_2 связывается с образованием дефектов. Для нестехиометрич. окислов $M_{1\pm y}O$ или $MO_{1\pm y}$ обсуждается справедливость выражения $y = \text{const } p_{O_2}^{1/n} \exp(-E_y/RT)$, где $1/n$ в зависимости от степени ионизации дефектов может принимать значения до $1/6$, а const и E_y связаны с термодинамич. параметрами дефектообразования выражениями $\text{const} = (2/n)\Delta S(\text{обр.})$ и $E_y = (2/n)\Delta H(\text{обр.})$. А. Гузей

X 1976 №9

Окислы

[CTT. 4920]

1975

Обзор

200602y Metal-insulator transition in selected oxides.
Honig, J. M.; Van Zandt, L. L. (Dep. Chem., Purdue Univ.,
West Lafayette, Indiana). *Annu. Rev. Mater. Sci.* 1975, 5,
225-78 (Eng). A review with 379 refs.

C.A. 1975 83 N24

Orreals 24/11 - 3/12, 1975

1975

87983h Thermodynamic and optical properties of alkaline earth oxides. Galtier, M.; Montaner, A. (Cent. Etud. Dynamique Etats Ordonnes, Univ. Sci. Tech. Languedoc, Montpellier, Fr.). *Phys. Status Solidi B* 1975, 70(1), 163-72 (Fr). A dynamical model is used for alk. earth oxides with rock salt structure. Long range forces are described by dipole-dipole interaction while short range forces are derived from a 3-body potential. The available exptl. data (specific heat, ir absorption, Raman and neutron scattering) are then compared with theor. values, deduced from the 1 and 2 phonon ds. of state. The fairly good agreement suggests the validity of the model and gives an interpretation of optical spectra.

(cp)
pactum

C.A. 1975. 83 n 10

Оксиды
Карбиды

1975

термод.
характер.

57: 91720v Thermodynamic characteristics of the formation of Group IVB metal oxides and carbides from simple substances. Khrushchev, M. S.; Polyakova, G. G. (USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1975, 135-62 (Russ). From *Ref. Zh., Metall.* 1977, Abstr. No. 5A36. Title only translated.

(+1) ☒

С.А. 1977. 87 N 12

Оксиды металлов.

1975

Кофстад Т.

(книга)

Отклонение от стехиомет-
рии, диффузия и электроп-
роводность в простых
оксидах металлов. Тер. е
анал. Под ред. Н.Н. Сименова
396 с. с  терм.

Библи. ЦВТНН. Новое поступл.
апрель 1976.

Окислы металлов

1975

4 Е4 К. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых окислах металлов. Коф-стад П. «Пер. с англ. М., «Мир», 1975. 399 с., ил., 2 р. 58 к.

Книга состоит из 14 глав. Гл. 1. Дефекты в кристаллах. Гл. 2. Реакции дефектов. Гл. 3. Равновесия дефектов. Гл. 4. Константы равновесия. Гл. 5. Диффузия и электропроводность. Гл. 6. Электрохимический перенос. Процессы, контролируемые дефектами. Гл. 7. Окислы элементов группы IIA. Гл. 8. Окислы элементов группы IVA. Гл. 9. Окислы элементов группы VA. Гл. 10. Окислы элементов группы VIA. Гл. 11. Окислы элементов групп VII и VIII. Гл. 12. Окислы редкоземельных элементов. Гл. 13. Окислы 5f-элементов. Гл. 14. Окислы элементов групп IB—VB.

Ф-1976 №4

Окунев
Мемадлов

ооооооо 3561

1975

Macdonald D.D.
et al.

смабмбмбмбмб

и рабб. в бббб

Thermodyn. nucl.
mater. 1974, Vol II
123-141.

Proceed. Symp. Vienna 1974

21-25 Oct.

Int. At. Energy Agency. Publ. 1975.

11 Б1046. Стабильность окислов при повышенной температуре. I. Испарение и диссоциация. Matoušek Josef. Stabilita oxidů za zvýšených teplot. C. I. Vypařování a disociace. «Sklář a keram.», 1975, 25, № 10, 289—291 (чеш.)

Обсуждаются способы получения термодинамич. характеристик окислов на основании изучения их термич. стабильности, давления пара кислорода и составляющего элемента, а также путем гидрирования. Приведены обычно используемые для расчетов термодинамич. соотношения.

С. Огородников

Oreocell

1975

meprucgilt

84:65913d Stability of oxides at high temperatures. I.
Evaporation and dissociation. Matousek, Josef (Vys. Sk.
Chem.-Technol., Prague, Czech.). Sklar Keram. 1975, 25(10),
9-91 (Czech). Thermodyn. relations are reviewed which are
necessary for calcn. of equil. compns. in silicate systems with
possible evapn. and dissoen. of oxides at 200-2800°. No refs.
K. A. Hlavaty

C.A. 1976. 84/110

Описи

1975

Никослав Н. У.

S^o₂₉₈, Δ H^o₂₉₈

"Ж. физ. химии" АН СССР
М. 1975. 12 с. ил. библиогр.
6 наф. (Рукопись деп. в ВИНИТИ
26 дек. 1975 г. № 3826-75 деп.)

(см. сульфиды; I)

60127.6744

TC

98019

Жислов переход
мех. металлов

1975

3717

- Book reviews.

"Acta crystallogr.", 1975, B 31, N 12,
2943-2944

(англ.)

0550 пик

(см. на об.)

514.520 5 42

ВИНИТИ

Фамилия		Transition metal oxides. Crystal chemistry, phase transition and related aspects. NBS 49. By C.N.R. RAO and G. V. SUBBA RAO. Pp. v+130. Washington: National Bureau of Standards, 1974. Price not known. The transition metal oxides form an interesting class of solids with properties arising from the presence of outer <i>d</i> electrons. This review is made up of data, with references up to 1973, describing crystal-structure and X-ray studies of transition metal oxides, the thermodynamics of phase equilibria, the crystal chemistry and phase transformations of binary oxides of 3<i>d</i>, 4<i>d</i> and 5<i>d</i> transition metals. Also included are changes in properties accompanying phase transitions. This is a very useful review of interest to those researchers entering this particular field. D. W. GOODWIN	о рубрик.
Заказ	реферата		
Говорар. Выработка	Рефе		Категория оплаты
	Редакт		
	Редакт		
Виза редактора		Виза зав. сект.	Сдана в набор

Перекиси

1975

Скрытие

2 В43. Современные воззрения на природу неорганических перекисных соединений. Вольнов И. И. В сб. «XI Менделеевск. съезд по общ. и прикл. химии. Реф. докл. и сообщ. № 1». М., «Наука», 1975, 16

Обобщены сведения о молек. анионах кислорода O_2^{2-} , O_2^- , O_3^- и O_4^- , характеризующих строение простых перекисных соединений — перекисей, надперекисей, озонидов, тетраокисей. Кратко изложены основные данные о строении гидроперекисей и комплексных перекисных соединений — пероксок-т и их солей, пероксо- и супероксокомплексов, пергидро- и гидропероксокомплексов, гидратов перекисей, пероксигидратов и гидратов пероксигидратов. Расшифрованы понятия «полиокиси водорода» и «дикислородные соединения». Приведена схема классификации неорг. перекисных соединений основанная на последних данных об их строении. Выявлен ряд закономерностей в их образовании в свете законов периодичности св-в и комплексообразования.

Резюме

X-1976 N2

Окисные системы

1976

4 Б958 К. Диаграммы состояния неметаллических систем. Т. 11. Окисные системы. Гл. ред. Бондарь В. В. (Итоги науки и техн. ВИНТИ АН СССР). М., 1976. 110с., ил., 60 к.

Х. 1977. N4

Оксиды

1976

№ 5 Б840 Деп. Зависимость стандартных изобарно-изотермических потенциалов образования оксидов первого переходного периода. Горичев И. Г., Ашха-

руа Ф. Г. (Редколлегия «Ж. физ. химии» АН СССР). М., 1976. 7 с., ил., библиогр. 11 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 20 окт. 1976 г., № 3688—76Деп.)

Из анализа справочных данных по линейной зависимости станд. электродных потенциалов оксидов первого переходного периода от X для р-ции: $MnO_x + 2xH^+ + x \cdot 2e = M + xH_2O$ (1), а также из того факта, что изменение свободной энергии Гиббса для р-ции: $MnO_x/x + (i-x)(x-j)/x$, $i, j M = (x-j)/(i-j) \cdot MO_i/i + (i-x)/(i-j) \cdot MO_i/j$ (2) приблизительно равно нулю — следует, что изобарно-изотермич. потенциал образова-

X 1977 N5

ния окислов из элементов можно приблизительно вы-
 разить в виде соотношения: $\Delta G_{\text{MO}_x}^\circ / x = (\Delta G_{\text{MO}_{j/j}}^\circ) i -$
 $-(\Delta G_{\text{MO}_{i/i}}^\circ) j / (i - j) + x \cdot (\Delta G_{\text{MO}_i}^\circ / i - \Delta G_{\text{MO}_j}^\circ / j / (i - j)) =$
 $= A + B \cdot x$ (3), где $\Delta G_{\text{MO}_i}^\circ$, $\Delta G_{\text{MO}_j}^\circ$ — термодинамич.

потенциалы для окислов известного состава MO_i ,
 MO_j . Значения величин — A и B для металлов 1-го
 переходного периода составили соотв.: Са 217,18
 и 72,84, Ti 131,83 и 13,14, V 124,50 и 22,50; Cr 128,57
 и 29,43, Mn 118,55 и 31,69, Fe 74,99 и 10,77, Co 76,88
 и 25,48, Ni 77,44 и 29,82, Cu 38,19 и 10,13. Соотно-
 шение (3) позволяет приблизительно, с точностью
 до 2—3 ккал/моль рассчитывать или уточнять станд.
 потенциалы образования окислов различного состава.

Автореферат

Окислы переходных
элементов

1976

85: 71446r New understanding of unusual oxidation states
in the transition groups. Joergensen, C. K. (Geneva, Switz.).
Naturwissenschaften 1976, 63(6), 292 (Eng). A review with 11
refs.

C.A. 1976. 85 N 10

1976

32. Казанас Е.К. и Чижиков Д.М. Давление
окислами химических элементов. М., 1976. 8
Ин-т металлургии им. А.А. Байкова).

Введ. сов. конф. в МГБ. УБГАИ. июль-июль 1977

остав пара над
2с.с. ил. (АН СССР.

УДК 536.4

Книга у Бермана Г.А. 1976

Коземас Е.К., Терсеев Д.М.

Давление и состав пара
над ожидаемыми минеральными
элементов.

Москва, Изд-во "Наука", 1976.

Окислы

1976

Nikolaev N. I.

$\Delta H_f \Delta S_f$

Zh. Fiz. Khim 1976,
50(6) - 1616 (Russ)

(или сульфиды; I)

Окислов

1976

Скочков В.М. и др.

Научн. Тр. Моск. Ун-т
1975 (102), 129 из. преп.

Ж. Металл. 1976,
Август. N 8A38.

(из металл.) I

Oxidebel everreale

1976

88: 95676d Procedure for high-temperature studies of thermodynamic properties of oxygen-containing systems using the emf. method. Zabeivorota, N. S.; Archugov, S. A. (USSR). *Sb. Nauch. Tr. Chelyabinsk. Politekhn. In-ta* 1976, (177), 40-3 (Russ). From *Ref. Zh., Metall.* 1977, Abstr. No. 11A101. Title only translated.

C.A., 1978, LB, N14

6 Б689. Энтропия и стабильность окисных систем.
Alcock C. B. Entropy in the stabilities of oxide systems. «Colloq. int. Oxyd. refract. filieres energ. haute temp., Odeillo, 1977». Odeillo, 1977, B16/1—B16/2 (англ.)

Энтропия индивидуальных окислов и энтропии образования межокисных соединений и тв. р-ров содержат две составляющих. Одна из них, термич. энтропия, может быть получена из калориметрич. измерений и ее высокая степень точности характеризует равновесие, достигнутое внутри данного образца. Другая составляющая, конфигурац. энтропия, не может быть получена из калориметрич. измерений, но вычисляется из разности свободной энергии и энтальпии образования системы. Поскольку эта составляющая существенно зависит от распределения ионов внутри решетки, то и здесь дальнейшее достижение равновесия является необходимым условием получения воспроизводимых результатов. Сообщается об обсуждении ряда примеров энтропий окисных систем, включающих энтропии фазовых переходов и искажений Яна—Теллера для простых

Х5293, 4Н26

Х5, №6, 1948

окислов, точечных дефектов и фаз Магнели для нестехиометрич. окислов, шпинельных фаз в системах со смешанными окислами. Отмечается необходимость выбора опорных станд. систем для сравнительной оценки результатов измерений. Сообщается о применении основанного на использовании неизотермич. электрохим. ячеек, нового метода, к-рый позволяет проводить относит. прямые измерения энтропий образования металлоокисных систем.

А. Кисилевский



Оксиды

тугоплавкие

1977

8 Б610. Применение солнечной печи для лабораторных исследований физико-химических свойств тугоплавких окислов при высоких температурах. Coutures J. P., Berjoan R., Benezech G., Granier B., Renard R., Foex M. Utilisation des fours solaires de laboratoire pour l'étude à haute température des propriétés physicochimiques des oxydes réfractaires. «Colloq. int. Oxyd. refract. filieres energ. haute temp., Odeillo, 1977». Odeillo, 1977, A6/1—A63 (франц.)

Описаны основные элементы конструкции солнечной печи мощностью 2 кВт и пирометра, применяющихся при теплофиз. и термохим. исследованиях тугоплавких окислов в интервале от 1600 до 2800° при давл. O_2 в интервале 0,2—1,0 ат. Исследованы системы $0,9 ZrO_2 - (0,10 - 0,0x) Y_2O_3 - 0,0x Ln_2O_3$, где $Ln = PЗЭ$. Получены данные по нестехиометрии окислов РЗЭ и хим. потенциалу кислорода в окислах. — Л. А. Резницкий

2, 18, 1978

Орещел

1977

(ΔGf) } 86: 146678z Dependency of standard isobaric-isothermal potentials of formation of first transition period oxides. Gorichev, I. G.; Ashkharua, F. G. (Mosk. Gos. Pedagog. Inst. im. Lenina, Moscow, USSR). *Zh. Fiz. Khim.* 1977, 51(2), 524 (Russ). Based on literature data on std. electrode potentials of 1st-row transition metal oxides (MO_x), an equation was derived for calcg. the free energy of formation of MO_x as function of x . The parameters for this equation are tabulated. The accuracy of calcn. is 2-3 kcal/mol.

C.A. 1977, 86 N20

Оксиды металлов

1977

6 В12. О классификации простых и смешанных окислов металлов. Лазарев В. Б., Шаплыгин И. С. «Докл. АН СССР», 1977, 237, № 4, 848—851

Предлагается классификация простых окислов, являющихся двойными соединениями, состоящими из одного металла и кислорода, и смешанных окислов, являющихся тройными соединениями, состоящими из двух различных металлов и кислорода. В основу классифи-

Х. 1978 № 6

кации положено отношение содержаний металла и кислорода — для простых окислов и суммы металлов и кислорода — для смешанных окислов. След. ступенями классификации являются: а) принадлежность к переходным или непереходным металлам; б) структурный тип; в) характер электропроводности; г) атомные и молек. св-ва. Указанная классификация обладает преимуществами при решении задач материаловедения в связи с проблемами электроники, электротехники, хим. промышленности и др.

Автореферат

Оксиды

1974

1 3 E149. О классификации простых и смешанных окислов металлов. Лазарев В. Б., Шаплыгин И. С. «Докл. АН СССР», 1977, 237, № 4, 848—851

Предлагается классификация простых окислов, являющихся двойными соединениями, состоящими из одного металла и кислорода, и смешанных окислов, являющихся тройными соединениями, состоящими из двух различных металлов и кислорода. В основу классификации положено отношение содержаний металла и кислорода — для простых окислов и суммы металлов и кислорода — для смешанных окислов. Следующими ступенями классификации являются: а) принадлежность к переходным или непереходным металлам; б) структурный тип; в) характер электропроводности; г) атомные и молекулярные свойства. Указанная классификация обладает преимуществами при решении задач материаловедения в связи с проблемами электроники, электротехники, химич. промышленности и др.

Ф. 1978 № 3

окучен

1977

Ferry V. et al

Contrib. Mineral Petrol.
1977, 63(1), 75-88 (Eng)

$\Delta G_f, \Delta H_f$

сч. прогн - I

Окучев

1977

Fardy V. et al

Contrib. Mineral. Petrol.
1977, 63(1), 89-102 Eng

SGf

сч счсчсчсч-I

Окислов

1978

6 E872. Термодинамическая характеристика природы металлизации окислов под давлением. Кус-

ков О. Л., Хитаров Н. И. «Письма в ЖЭТФ», 1978, 27, № 5, 288—292

Обсуждается возможность химич. разложения окислов до металла и газообразного кислорода под давлением как вероятная альтернатива металлизации окислов.

Резюме

ф. 1978 № 6

Воскресенье

1948

1 Б840. Энергии предпочтения ионов и энергетика координационных полиэдров. Резницкий Л. А., Гусей А. С. «Итоги науки и техн. ВИНТИ. Сер. Хим. термодинам. и равновесия», 1978, 4, 79—117

Рассмотрены соотношения между теплотами образования двойных окислов из простых и энергиями катионных переходов с изменением координац. числа. На основании лит. данных предложена система согласованных значений энергий предпочтения ионов к октаэдрич. позициям. Указаны ограничения правила аддитивности теплоемкости при априорной оценке теплоемкостей нек-рых двойных окислов. Резюме

Д117

к. 1949, N1

Бинарные оксиды

1978

термод.
структура

Д 2 Б760. Термодинамика и структура нестехиометрических бинарных оксидов. Sorensen O. Toft. Thermodynamics and structure of nonstoichiometric binary oxides. «Phase Diagrams. Mater. Sci. and Technol. Vol. 5». New York c. a., 1978, 75—125 (англ.)

X. 1981 N 2

Окисели III группы

1978

91: 28228h Thermodynamic properties of Group III oxides.
Srivastava, R. D.; Farber, Milton (Dep. Chem. Eng., Indian
Inst. Technol., Kanpur, India). *Chem. Rev.* 1978, 78(6), 627-38
(Eng). A crit. review with 213 refs.



C.A. 1979, 91, N4

Database reference

1979

91:182355d Using equivalent differences for approximate estimation of thermodynamic functions for binary oxide compounds. Belyaev, E. K.; Tseitlin, N. A. (USSR). *Khim. Termodin. Termokhim.* 1979, 46-9 (Russ). Edited by Tulupov, V. A. Izd. Nauka: Moscow, USSR. A method was developed for the calcn. of std. heats and free energies of formation of double oxides from the known values of the thermodyn. parameters of the 2 corresponding fluorides.

A 117; 467

C.A. 1079, 91, N22

Кислород

1979

22 Б837 Деп. Процессы испарения сложных окислов.
Казенас Е. К., Звиададзе Г. Н., Ермилова И. О., Тагиров В. К., Чадин А. Н., Нестеренко П. А. Ин-т металлургии АН СССР. М., 1979. 46 с., ил., библиогр. 169 назв. (Рукопись деп. в ВИНТИ 7 авг. 1979 г., № 2923—79 Деп.)

На основе лит. и эксперим. данных проведена систематизация процессов перехода сложных оксидов в парогазовую фазу в зависимости от положения соотв-щих элементов в Периодической системе элементов. Представлены состав парогазовой фазы над сложными оксидами (боратами, алюминатами, карбонатами, карбонилами, нитратами, нитритами, сульфатами, хроматами, фосфатами, молибдатами, вольфраматами, перренатами, гидроксидами), а в ряде случаев парц. давл. парогазовых компонентов и их теплоты сублимации. Показана определенная закономерность летучести оксидов в зависимости от порядкового номера элемента в таблице Менделеева. Автореферат

Нестеренко

д. 1979, № 22

Класс

1979

192. МАУРАХ М.А., МИТИН Б.С. Жидкие тугоплав
Металлургия, 1979. - 287с. УДК 669.018.

б-ка ЦБТАН. Либ-гребр. 1980

ие окислы.-М.:

45(ц)

Окислы

1979

17 Б892 К. Состав фаз при равновесном нагревании некоторых окислов до высоких температур. Препр. Ин-т металлургии. Уральск. науч. центр АН СССР. Монсеев Г. К., Ватолин Н. А., Синярев Г. Б., Трусов Б. Г., Слынько Л. Е. Свердловск, 1979. 34 с., ил. 25 к.

Состав
фаз

Проведены машинные опыты по нагреванию в аргоне 20 конденс. окислов кальция, алюминия, кремния, титана, хрома, ванадия, железа, ниобия до их перехода в газопаровую фазу. Определены характеристики превращений и фазовых переходов, т-рные зависимости парц. давл. компонентов газ. фазы и состав конденс. фазы. Предложены р-ции образования основных компонентов фаз. Полученные результаты существенно дополняют и в ряде случаев подтверждают и уточняют имеющиеся эксперим. и расчетные данные. Резюме

Л. 1979, N 17

Оксиды переходн. металлов

1980

65801 10859
отмеч

94: 95096p On the thermodynamic stability of 3d-transition metal oxides. Mekhandzhiev, D.; Proinova-Mekhandzhieva, R. (Inst. Gen. Inorg. Chem., Sofia, Bulg.). *Dokl. Bolg. Akad. Nauk* 1980, 33(8), 1077-80 (Eng). The temp. regions of thermodyn. stability were detd. for various transition metal oxides at different O pressures. The stable oxides MO_x at increasing temps. are those with lower values of x , whereas at increasing O pressures those with higher x are more stable. From the results it is possible to predict which oxide should be obtained as a result of the decompn. of different salts or of the oxidn. of the metal under certain conditions. Also the thermodyn. stabilities of the oxides can be predicted as well as the changes that must take place in the stoichiometry of an oxide upon change in temp. and pressure.

С.А. 1981.24 N12

Journal receipt

1980

7 94: 21280x New formula for the calculation of standard entropies of binary oxides. Omiadze, I. S.; Nadiradze, A. A.; Tsagareishvili, D. Sh.; Mgaloblishvili, N. P. (Inst. Metall., Tbilisi, USSR). *Izv. Akad. Nauk. Gruz. SSR, Ser. Khim.* 1980, 6(3), 237-43 (Russ). By using the concept of partial std. entropy in double oxides, the Einstein's equation for the frequency of harmonic oscillations and the approaches of the classical theory of solids, a new expression was derived for the calcn. of the std. entropy (S_{298}) of double oxides of the type $nA.mB$ (A and B are solid oxide components, n and m are stoichiometric coeffs.): $S_{298} = nS^A(\rho/\rho)^{4/3} + mS^B(\rho_B/\rho)^{1/3}$, where S^A , S^B , ρ_A , and ρ_B are std. entropies and densities of the oxides A and B and ρ is d. of the double oxide. The av. errors of the calcd. data was ± 2 cal/deg. mol.

(5288)

C. S. 1981. 94 N 4

Оксиды двойные

1980

1 3 Б774. Новая формула для расчета стандартных энтропий двойных оксидов. Омиадзе И. С., Надирадзе А. А., Цагарейшвили Д. Ш., Мгалоблишвили Н. И. «Изв. АН ГрузССР. Сер. хим.», 1980, 6, № 3, 237—243 (рез. груз., англ.)

Выведена новая ф-ла для расчета S_{298} двойных оксидов A_nB_m , где А — первый оксид, В — второй: $S_{298} = nS_{298}^A(\rho A/\rho)1/3 + mS_{298}^B(\rho B/\rho)1/3$, где $S_{298}^{A,B}$ — энтропии простых оксидов, ρ_A, ρ_B — плотности простых оксидов, ρ — плотность соединения. При выводе ф-лы использованы упрощающие предположения постоянства дебаевских т-р, параметров Грюнайзенца, энергия сцепления в двойном оксиде отождествлена с суммой энергий сцепления простых оксидов. Вычисленные значения S_{298} согласуются с эксперим. до 1—3 э. е.

Л. А. Резницкий

(45)

Х. 1981/1/3

Двойные окислы

1980

/ 94:53896u Method of calculating standard entropies of double oxides. Omiadze, I. S. (USSR). *Materialy Dokl.-i Resp. Nauch.-tekhn. Konf. Molod. Uchenykh, Tbilisi, 1979, Tbilisi 1980, 62-6 (Russ). From Ref. Zh., Metall. 1980, Abstr. No. 12A22. Title only translated.*

(5_{298}°)

C. A. 1981.54, N8

У) 3 Б793. Взаимная связь стандартных теплот образования оксидов металлов и приведенных потенциалов ионизации. Осипов К. А. «Докл. АН СССР», 1980, 254, № 2, 410—414

Для 33 оксидов различных металлов рассчитаны приведенные потенциалы ионизации (ПИ) и их значения сопоставлены со станд. теплотами образования оксидов различного хим. состава. Установлено наличие линейной зависимости между значениями теплот образования и

приведенными ПИ. Дано уравнение, прямой, выражающей эту зависимость. Сделан вывод, что приведенные ПИ могут быть использованы как важные параметры для решения различных физ.-хим. задач. Автореферат

(Δ Hf)

X. 1981/13

Оригинал не передан

1980

Г, 4 Hf

93: 246535p Interrelation of standard heats of formation of metal oxides and reduced ionization potentials. Osipova, K. A. (Inst. Metall. im. Baikova, Moscow, USSR). *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 1980, 254(2), 410-14 [Phys. Chem.] (Russ). A linear relation is demonstrated between the std. heats of formation, ΔH_{298}^0 , of metal oxides and reduced ionization potentials, I_r . The I_r values were calcd. by using the expression $I_r = nI_2^M \cdot mI_1^O / nI_2^M + mI_1^O$, where I_1^O = 1st ionization potential of O atom, I_2^M = 2nd ionization potential of metal, and m and n are no. of M and O atoms, resp. Present results and earlier ones for sulfides (O., et al., 1980) indicate that I_r can be used in estn. of ΔH_{298}^0 of inorg. compds.

С. А. 1980. 93 №26

Okunishi September

1980

94: 128430y Entropy's approximate formula of the equilibrium constants for the formation reactions of solid metallic oxides. Zhou, Zhen-Hua (Dep. Dye Chem., Tientsin Coll. Text. Eng., Tientsin, Peop. Rep. China). *K'o Hsueh Tung Pao* 1980, 25(Spec. Issue), 235-7 (Ch). An entropy approxn. equation esp. suitable to calc. the equil. const. $\log K_p$ of solid metal oxides during metallurgical process is derived. This equation $\ln K_p = -(\Delta H_{298}^\circ / RT) + (\Delta S_{298}^\circ / R)$ was used to calc. the equil. const. of a no. of known oxides, and the results were compared with known values.

(K_p)

C. A. 1981.9.9. MB

Оксиды металлов

1981

24 В21 К. Физическая химия окислов металлов.
Балакирев В. Ф. М., Наука, 1981, 202 с., ил. 2 р.
20 к.

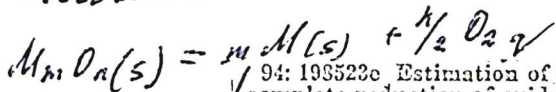
Обзор работ по современному состоянию основных направлений физ.-хим. исследований окислов металлов (синтез, структура, св-ва, термодинамика и кинетика окисл.-восст. процессов). По резюме

термоди-
намике

Х. 1981, 19 (В), № 24.

1981

Oxide



94: 198523c Estimation of the standard entropy change on complete reduction of oxide $M_m O_n$. Nakamura, Tetsuro (Res. Lab. Eng. Mater., Tokyo Inst. Technol., Yokohama, Japan 227). *J. Solid State Chem.* 1981, 36(2), 234-40 (Eng). The std. entropy changes ΔS° for the redn. of nonmagnetic, nonconducting oxides, $M_m O_n(s) = m M(s) + (n/2) O_2(g)$, were estd. as functions of m , n , and temp., T , from motional entropies of O mols. and vibrational entropies of solid phases. The expression: $\Delta S^\circ_{calc} = a.m + b.n$ with const. a and b based on effective Debye temps., $\Theta_M = 165$ K for M and $\Theta_{ox} = 540$ K for $M_m O_n$, agrees well with the obsd. ΔS°_{obs} for M_2O , MO , M_2O_3 , MO_2 , M_2O_5 , and MO_3 at 300-1300 K. Possible electronic entropy corrections are applied to M_2O_7 and MO_4 .

(45)

C.A. 1981, 94, N24

M(m) O(n)

Оксиды

1981

17 Б861. Вычисление изменения стандартной энтропии при полном восстановлении оксида M_mO_n . Nakamura Tetsuro. Estimation of the standard entropy change on complete reduction of oxide M_mO_n . «J. Solid State Chem.», 1981, 36, № 2, 234—240 (англ.)

Предложен метод расчета ΔS^0 р-ции диссоциации оксидов M_mO_n (тв.) = mM (тв.) + $(n/2) O_2$ (газ) для оксидов M_2O , MO , M_2O_3 , MO_2 , M_2O_5 , MO_3 , M_2O_7 и MO_4 в интервале 300—1300 К. Метод основан на представлении величины ΔS^0 в виде ур-ния $\Delta S^0 = a(T)m + b(T)n$, где постоянные a и b вычисляются по эффективному $\Theta_D = 165$ К для любого M и 540 К для любого оксида, к-рый должен не иметь магнитного или электронного вклада в энтропию. Изменение $\Delta S^0 = 6,68 m + 19,21 n$, э. е. для $T = 300$ К, $\Delta S^0 = 7,03 m + 17,38 n$ для $T = 800$ К и $\Delta S^0 = 7,33 m + 16,53 n$ для $T = 1300$ К в хорошем согласии с эксперим. данными. Исключением являются оксиды максим. степеней окисления M_2O_7 и

т.ж.н.
св-ва

X. 1981 № 17

МО₄, для к-рых необходим учет электронного вклада в энтропию, вызванного частичным восстановлением, т. е. переносом заряда с O²⁻ на катион. Подобный учет, связанный (а) с возбуждением из основного состояния и (б) с последующим образованием парамагнитного состояния с $S=1$ и переходом электронов в зону проводимости, приводит к хорошему согласию с опытными данными.

Л. А. Резницкий

19 Б956. . Термодинамика двойных окисных систем. Температуры Дебая, энергия нулевых колебаний и энергия стабилизации оксидов со структурами шпинели и ильменита. Попов С. Г., Левицкий В. А. «Ж. физ. химии», 1981, 55, № 5, 1155—1159

(Дебай)

На основании данных по спектрам поглощения в ИК-области, упругим постоянным, низкот-рным теплоемкостям и т-рам плавления двойных оксидов со структурой шпинели и ильменита определены их т-ры Дебая и величины энергий нулевых колебаний $E_{н.к.}$. В приближении ионной модели рассчитаны энергии стабилизации $E_{ст}$ этих соединений. Показано, что $E_{ст}$ хромитов металлов подгруппы железа в ~ 8 раз превосходит $E_{ст}$ алюминатов и титанатов. Величины $E_{н.к.}$ вносят незначительный вклад в энергию крист. решетки сложных оксидов. Вклад $E_{ст}$ в полную энергию решетки двойных оксидов достигает $\sim 5\%$. Резюме

- 19 Б956. Термодинамика двойных окисных систем. Температуры Дебая, энергия нулевых колебаний и энергия стабилизации оксидов со структурами шпинели и ильменита. Попов С. Г., Левицкий В. А. «Ж. физ. химии», 1981, 55, № 5, 1155—1159

На основании данных по спектрам поглощения в ИК-области, упругим постоянным, низкот-рным теплоемкостям и т-рам плавления двойных оксидов со структурой шпинели и ильменита определены их т-ры Дебая и величины энергий нулевых колебаний $E_{н.к.}$. В приближении ионной модели рассчитаны энергии стабилизации $E_{ст}$ этих соединений. Показано, что $E_{ст}$ хромитов металлов подгруппы железа в ~ 8 раз превосходит $E_{ст}$ алюминатов и титанатов. Величины $E_{н.к.}$ вносят незначительный вклад в энергию крист. решетки сложных оксидов. Вклад $E_{ст}$ в полную энергию решетки двойных оксидов достигает $\sim 5\%$. Резюме

Дебай

24 Б898. Многокомпонентные оксиды при градиенте кислородного потенциала. Schmalzried H., Laqua W. Multicomponent oxides in oxygen potential gradients. «Oxid. Metals», 1981, 15, № 3—4, 339—353 (англ.)

Процесс расслаивания первоначально гомогенных оксидных фаз (тв. р-ры, бинарные соединения) в поле градиента кислородного потенциала рассмотрен теоретически и обнаружен экспериментально. При наличии разности $P(O_2)$ по обе стороны от кристалла (напр., Co , Mg) O происходит смещение кристалла в сторону большего давления O_2 . Тернарные соединения ($NiTiO_3$, Co_2TiO_4 и др.) в подобных условиях распадаются на простые оксиды, несмотря на то, что они сосуществуют в равновесных условиях с индивидуальными оксидами при обоих значениях $P(O_2)$. Выведены уравнения массопереноса катионов, электронов (дырок) в практически неподвижном кислородном каркасе. Полученные результаты имеют значения для понимания процессов окисления и оксидирования металлов, а также поведения твердофазных ячеек с O^{2-} -ионными электролитами.

Л. А. Резницкий

X.1981, 19, N24

Окислы

1981

1 Б1062. Влияние дефектов структуры на фазовые переходы в окислах. Сухаревский Б. Я., Гавриш А. М. «Физ. химия окислов мет.» М., 1981, 156—164

Рассмотрена термодинамика образования зародышей новой фазы при полиморф. превращении в кристалле, содержащем точечные дефекты типа примесных атомов замещения и вакансий. Предложен механизм влияния точечных дефектов на процессы зародышеобразования при переходе. Согласно этому механизму в случае перераспределения указанных дефектов между матричной фазой и зародышем существенно уменьшается работа образования последнего. Это приводит к смещению T -ных характеристик полиморф. превращения и влияет на кинетику перехода. Высказанные соображения подтверждены эксперим. данными по изучению $\alpha \rightleftharpoons \beta$ -перехода ZrO_2 и тв. р-ров системы ZrO_2-HfO_2 .

Резюме

(+1)

Х. 1982, 19 AB, N1. $ZrO_2(Tt_2)$

Okucelir

1981

Van Viter L. G.

J. Am. Ceram. Soc.

(Tm)

1981, 64 (9), 544-548.



(см. Заголовки, I).

Октябрь

1981

Тн; Ср

С. Д. 1981, 95(6) N 53018e

Ожески

1982

100: 127679a Calculation of the enthalpy of formation of ions in crystalline halides and oxides. Manakov, A. I.; Egorova, E. I.; Novchikhina, G. P. (Vladimir. Politekh. Inst., Vladimir, USSR). Deposited Doc. 1982, SPSTL 557 Khp-D82, 8 pp. (Russ). Avail. SPSTL. A method was developed for the calcn. of the heats of formation of halides and oxides, which takes into account the heats of sublimation, ionization, and dissocn. and the ion characteristics (charges and radii). The approach was tested on alkali metal and alk. earth halides and oxides and the calcd. values are compared to the available exptl. (literature) data.

$\Delta_f H^\circ$;

☒ (4) Заполнен ● и

С. А. 1984, 100, N 16

Оксиды

Структура

X. 1984, 19,
N 23

1984

23 Б2034. Прогнозирование структур оксидов переходных металлов с применением метода минимизации энергии. Structure prediction of transition-metal oxides using energy-minimization techniques. Catlow C. R. A., Cormack A. N., Theobald F. «Acta crystallogr.», 1984, В40, № 3, 195—200 (англ.)

Предложен машинный метод прогнозирования крист. структур ионных кристаллов, основанный на минимизации энергии крист. решетки в зависимости от координат атомов и с учетом межатомных Пт, основанных на известной ионной модели кристалла из идеальных октаэдров. Применимость методики проиллюстрирована на изученных ранее структурах $B\text{-VO}_2$ (I), $\text{Na}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$ (II), $\text{Na}_2\text{Ti}_6\text{O}_{13}$ (III), и изоструктурном I $B\text{-TiO}_2$, структура к-рого ранее не определялась. Получено хорошее соответствие экспериментально определенных и рассчитанных моделей структур I—III. Отклонение реальных структур от идеальных моделей, построенных из правильных октаэдров хорошо воспроизводятся. Указывается на перспективность предложенной методики для прогнозирования структур оксидов переходных металлов и других ионных и частично ионных соединений.
М. Б. Варфоломеев

Окислительные

1984

№ 136991x Unified apparatus for investigating the thermo-
dynamic properties of solid oxides, Petrov, A. N.; Cherepanov,
A.; Kropanev, A. Yu.; Zuev, A. Yu. (Ural. Gos. Univ.,
Sverdlovsk, USSR). *Khim. Tverd. Tela* 1984, 7, 158-61 (Russ).
exptl. installation, based on measurements of emfs. with oxide
is described. The activity of O in a complex oxide and its free
of formation are derived from the emf. data.

(A+G)

С. А. 1986, 104, N 16

Оксиды переходных элементов

1984

11 Б3091. Оксиды переходных элементов с металлической проводимостью. Шаплыгин И. С., Лазарев В. Б. «Ж. неорганич. химии», 1984, 29, № 2, 516—524

Дан обзор св-в простых и двойных оксидов переходных металлов, имеющих металлич. тип проводимости. Приведен фактич. материал для оксидов, кристаллизующихся в различных структурных типах каменной соли, корунда, рутила, перовскита, пироклора, шпинели. Рассмотрены причины, обуславливающие появление металлич. проводимости у таких представителей типичных диэлектрич. соединений, как оксиды. Резюме

(обзор)

Х. 1984, 19, N 11

Окислы

1984

104:76242s A compilation of Gibb's energy data for forty metal oxide buffers. Sreedharan, O. M.; Mallika, C. (React. Res. Cent., Dep. At. Energy, Kalpakkam, 603 102 India). *React. Res. Cent., Kalpakkam, [Rep.] RRC 1984, RRC-69, 37 pp. (Eng).* Std. free energy data for metal oxides systems are coupled in form of two-term expressions. Data for about 16 of the 40 systems were critically assessed by the 3rd law treatment of the exptl. (emf.) data. Ellingham diagrams are also presented, for different ranges of oxygen potentials so as to facilitate a choice of condensed buffer oxygen mixts., which could be used as ref. electrodes in emf. measurements or to provide well-defined oxygen potential in the synthesis of compds.

(46°)

C.A. 1986, 104, N10

(all. open.)

Окислы

1984

21 Б3141. Данные по термическому расширению. II. Бинарные окислы со структурой флюорита и рутила MO_2 и структурой антифлюорита M_2O . Thermal Expansion data: II. Binary oxides with the fluorite and rutile structures, MO_2 , and the antiferite structure, M_2O . Taylor Derek. «Trans. and J. Brit. Ceram. Soc.», 1984, 83, № 2, 32—37 (англ.)

Обзор. В широкой обл. т-р представлены данные по термич. расширению (ТР) диоксидов MO_2 , имеющих

термическое
расширение

(обзор)

Х. 1984, 19, № 21

структуру рутила ($M = \text{Cr, Ge, Ir, Mn, Nb, Pb, Ru, Si, Sn, Te, Ti, V}$) и флюорита ($M = \text{Am, Bk, Ce, Cm, Hf, Np, Pr, Pu, Th, U, Zr}$), а также со структурой антифлюорита — Li_2O . Для сравнения данных ТР использован «закон соответственных состояний» (ЗСС) и для нек-рых диоксидов рассчитаны приведенные параметры, отнесенные к значениям при т. пл. Приведены данные по фазовым переходам оксидов. Показано, что MO_2 со структурой флюорита частично группируются в изоэлектронные серии и для MO_2 со структурой рутила не применим ЗСС. На основе анализа длин связей $M\text{—O}$ и O—O в различных кристаллографич. направлениях обсуждается анизотропия ТР в окислах со структурой рутила. Библ. 124. В. Ф. Пономарев

OKUCATE

1985

103: 201791c Calculation of thermodynamic properties of minerals using the model of the crystal lattice vibrational spectrum of silicates and oxides. Agoshkov, V. M. (Inst. Geokhim. Anal. Khim. im. Vernadskogo, Moscow, USSR). *Geokhimiya* 1985, (10), 1441-54 (Russ). A method of calcn. of thermodyn. properties (heat capacity, entropy, free energy, and internal energy) of oxides and silicates is suggested. The model uses the Debye approxn. for acoustic vibrations and the low-frequency part of optical ones as well as the Einstein approxn. for the high-frequency internal optical modes. Agreement of calcd. by this method and measured S_T^0 and C_p for 16 minerals at 200-1500 K is within 2.k-3%. The method can be used for the calcn. of thermodyn. functions of the high-pressure phases obtained in the diamond anvils at high P and T.

(C_p , S_T^0 , ΔG_T^0)

ⓧ(H) CERNKAT ●

C.A. 1985, 103, N 24

(all: open.)

Okeech
MO

(Im. 22009)

1985

102: 192281m Empirical relations between the heats of formation of the different valence states of solid, polyvalent metal oxides. Hisham, Mohamed W. M.; Benson, Sidney W. (Loker Hydrocarbon Res. Inst., Univ. South. California, Los Angeles, CA 90089 USA). *J. Phys. Chem.* 1985, 89(10), 1905-9 (Eng). An empirical relation exists between the heats of formation of oxides MO, which have 3 or more well-defined stoichiometric forms and valence states of metals (mostly transition), M. The relation can be presented as a two-parameter equation $\Delta H_{p,298} = a_r + bz^2$ (± 1 kcal).

($\Delta_f H$)

C.A. 1985, 102, N 2221

Окислы двухвалентных металлов

1985

1 E657. Фазовые переходы и поведение при высоких давлениях окислов двухвалентных металлов. Phase transition and high-pressure behavior of divalent metal oxides. Jog K. N., Singh R. K., Sanyal S. P. «Phys. Rev. B: Condens. Matter», 1985, 31, № 9, 6047—6057 (англ.)

Расчет фазовых переходов, относительной фазовой стабильности и упругих свойств при высоких давлениях окислов MO (где M — двухвалентный щелочноземельный или переходный металл) проведен с использованием двух потенциалов межионного взаимодействия вида $V(r) = B \cdot \exp(-r/\rho) - C \cdot r^{-6}$, где в одном случае параметры короткодействующего взаимодействия B и ρ определялись из упругих, диэлектрических и структурных констант, а во втором — с помощью волн. ф-ций Клемента в приближении Хартри — Фока, C —

III
1/2;

ф. 1986, 18, N1

коэф. взаимодействия Ван-дер-Ваальса. Расчетные значения давления фазового перехода (ФП) из структуры $B1$ (типа NaCl) в структуру $B2$ (типа CsCl) всех оксидов типа MO лежат в диапазоне 85—202 ГПа, которые в среднем несколько завышены по сравнению с эксперим. данными. Тенденция к повышению давления перехода $B1 \rightarrow B2$ с уменьшением отношения радиусов катиона и аниона правильно отражает эксперим. результаты. Относительные объемные изменения при этом ФП находятся в пределах от 3,3 до 6,5%. Отношение модуля сдвига к объемному при давлении ФП для различных оксидов MO составляет 0,06—0,22. Библ. 36.

А. И. К.

Окислы
металлов

1985

102: 212973u Phase transition and high-pressure behavior of divalent metal oxides. Jog, K. N.; Singh, R. K.; Sanyal, S. P. (Condens. Matter Res. Cent., Rani Durgawati Univ., Jabalpur, 482001 India). *Phys. Rev. B: Condens. Matter* 1985, 31(9), 6047-57 (Eng). The phase transitions, relative stability, and high-pressure elastic behavior of alk. earth and transition metal oxides were predicted by 2 well-known model potentials developed by M. J. L. Sangster and A. M. Stoneham (1980) and W. C. Mackrodt and R. F. Stewart (1979). The phase transition pressures for these oxides are predicted to lie in the range 85 to 202 GPa. The relative vol. changes corresponding to these transition pressures occur from 3.3 to 6.5%. The results for transition pressures are higher than the available exptl. data. The transition pressure from B1 to B2 structures increases with decreasing cation-to-anion-radii ratio at least quant. as the trend shown by the current data available for some of these oxides. The variation of elastic consts. with pressure predicted from these models followed the same trend as that revealed by modified-electron-gas-model-theory. The ratio of shear-to-bulk modulus at the predicted transition pressure for these oxides lies between 0.06 to 0.22. The discrepancies between theor. and exptl. results were ascribed to the many-body interactions which are significantly important in ionic crystals.

(спай. реферат)
объекта

C. A. 1985, 102, N 24,

Cell. open.

Окислы

(От 22419)

1985

4 E501. Испарение окислов. Vaporization behavior of oxides. Lamoignon R. H., Hildenbrand D. L., Brewer, L. «High Temp. Sci.», 1985, 20, № 1, 37—49 (англ.)

Рассмотрены данные по стандартной энтропии, энтальпии образования и энергии Гиббса для окислов металлов щелочной, щелочноземельной группы, групп цинка, бора и кремния. С помощью ЭВМ рассчитаны таблицы термодинамич. величин и парциальные давления при восстановительных, нейтральных и окислительных условиях. С помощью уравнения Герца—Кнудсена определена температурная зависимость парциальных давлений и максим. скоростей испарения. В. Г.

(испарение)

ср. 1986, 18, № 4

Окислительные свойства

1985

/ 102: 138671a Thermodynamic considerations of infinite dilute solutions of metal-oxygen liquid binary systems based on associated solution model. Wasai, Kyoko; Mukai, Kusuhiro (Dep. Metall., Kyushu Inst. Technol., Kitakyushu, Japan). *Nippon Kinzoku Gakkaishi* 1985, 49(2), 134-43 (Japan). Std. free energies, enthalpies, and entropies of formation of metal oxides were calcd. from published values for the heats and entropies of O in liq. metals, involving the reaction $0.5 \text{ O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{O}(\text{at})$. The calcd. values were compared to the exptl. data.

$(\Delta_f G, \Delta_f H,$
 $\Delta_f S)$

C. A. 1985, 102, N 16.

(all open)

Оксиды (Неорг. химия)

1986

Белоконова, Надежда Анатольевна.

Синтез и физико-химические свойства сложных оксидов меди (II), цинка, магния, хрома (III), алюминия, марганца (III) со структурой шпинели : Автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. хим. наук. (02.00.01) / Урал. политехн. ин-т им. С.М. Кирова. — Свердловск, 1986. — 23 с.: граф.

Библиогр.: с. 21—23 (13 назв.).

№ 10974

A9 № 398 [86-18525a]

ВКП 1—5.06.87

Изд-во «Книга»

Окислы
металлов

1986

Duffy J. A.

хим.
сб. 36.

J. Solid State Chem.
1986, 62 (2), 145-57.

(сст. $\text{Na}_2\text{O}(x)$; III)

Термодинамика
оксидов

1986

/ 106: 39411s Thermodynamics of Oxides: Handbook. (Termo-
dinamika Oksidov: Spravochnik) Kulikov, I. S. (Metallurgiya:
Moscow, USSR). 1986. 341 pp. (Russ) rub 1.80.

(монография)

С. А. 1987, 106, № 6

Гидратированные

1986

Оксиды

элементов IV и

V групп

20 В1 К. Гидратированные оксиды элементов IV и V групп. Плётнев Р. Н., Ивакин А. А., Клещев Д. Г., Денисова Т. А., Бурмистров В. А. М.: Наука, 1986. 157 с., ил.

Приведены х-ки гидратированных оксидов титана, олова, ванадия и сурьмы. Рассмотрены данные спектроскопич., дифракционных и электрофиз. методов исследования состояния водорода, протонной проводимости, процессов ионного обмена и хим. воздействия. На основе анализа результатов изучения структуры и св-в обсуждена хим. природа гидратированных оксидов элементов IV и V групп Периодической системы. Резюме

Х. 1986, 19, N 20

Оксиды металлов

1986

9 B10. Получение и реакции некоторых новых систем оксидов металлов. Synthesis and reactions of some novel metal oxide systems. Rao C. N. R. «Proc. Indian Nat. Sci. Acad.», 1986, A52, № 4, 699—714 (англ.).

Обзор. Обсуждено образование оксидов металлов при периодич. срастании («recurrent intergrowth») двух структурно подобных, но различных по составу фрагментов. Рассмотрен синтез комплексных оксидов металлов при разл. тв. р-ров нек-рых предшественников оксидов. Приведены примеры метастабильных оксидов, полученных путем топотактич. восстановления исходных оксидов или топотактич. дегидратации исходных гидроксидов. Библ. 29.

По резюме:

(обзор)

X. 1987, 19, N 9.

Термодинамика
тв. растворов
окислов

1986

106: 39412t Phase Diagrams and Thermodynamics of Oxide
Solid Solutions. (Fazovye Diagrammy i Termodinamika Oksidnykh
Tverdykh Rastvorov) Suvorov, S. A.; Semin, E. G.; Gusarov, V. V.
(Izd-vo LGU: Leningrad, USSR). 1986. 139 pp. (Russ) rub 1.10.

(монография)

С. А. 1987, 106, № 6

Тугоплавкие
Оксиды

1987

108: 138786r Phase Diagrams of High-Melting Oxides: Handbook,
No. 5: Binary Systems, Pt. 3. (Diagrammy Sostoyaniya Sistem
Tugoplavkikh Oksidov: Spravochnik, Vyp. 5: Dvoinye Sistemy, Ch.
3) Galakhov, F. Ya.; Editor (Nauka, Leningradskoe Otd.:
Leningrad, USSR). 1987. 284 pp. (Russ) rub 1.20.

диаграм-
мы составов.

(монография)

С.А. 1988, 108, № 16

Оксиды

1987

) 17 Б2338. Обзор по тройным оксидам [металлов] первого переходного периода LiMO_3 ($M = \text{Sc} - \text{Cu}$). A survey of first-row ternary oxides LiMO_2 ($M = \text{Sc} - \text{Cu}$). Hewston T. A., Chamberland B. L. «J. Phys. and Chem. Solids», 1987, 48, № 2, 97—108 (англ.)

Обзор. Рассмотрены исследования тройных оксидов LiMO_2 (где $M = \text{Sc} - \text{Cu}$) методами РСА, ДСК и ИК-спектроскопии. Приведены также данные по т-рой зависимости их магн. восприимчивости и сопротивления. Отмечена близость структуры, а также оптич. и магн. х-ки всех изученных оксидов. Отмечено, что при $T > 400^\circ \text{C}$ в них происходит фазовый переход и подчеркнуто доминирующее влияние перекрывания d -орбиталей и делокализации электронов на магн. св-ва оксидов. Библ. 70.
А. В. Бобров.

(обзор)

Х. 1987, 19, ~ 17

Оксиды переходных
металлов

1987

MeO_x

106: 202841t Temperature regions of stability of oxides of the 4d transition metals. Mekhandzhiev, D.; Yanakiev, N. (Inst. Gen. Inorg. Chem., 1040 Sofia, Bulg.). *Dokl. Bolg. Akad. Nauk* 1987, 40(2), 67-70 (Eng). A thermodyn. approach was used to det. the temp. intervals in which transition metal oxides are stable. The thermodyn. stability is derived from the changes in the free energy of formation in the reaction $M + 0.5xO_2 = MeO_x$. The enthalpy values det. the type of the compd., stoichiometric or not.

(AH)

C.A. 1987, 106, N 2.4

22 В1. Новые пути синтеза комплексных оксидов металлов. Synthesis of complex metal oxides by novel routes. Rao C. N. R., Gopalakrishnan J. «Accounts Chem. Res.», 1987, 20, № 6, 228—235 (англ.)

Обзор. Суммированы новейшие подходы к синтезу комплексных оксидов металлов, широко применяемых в различных обл. современной техники. Рассмотрены то-похим. методы синтеза, в к-рых р-ционная способность реагентов определяется их крист. структурой, и методы, основанные на превращениях соединений — предшест-венников оксидов и представляющие современную аль-тернативу традиц. керамич. подходам, а также гель-золь-ные методы, обычно включающие гидролиз или полиме-ризацию ионных частиц в водн. растворах. Библ. 65.

А. Д. Рябов

(Обзор)

Х. 1987, 19, № 22.

Оксиды

1987

20 БЗ120 К. Оксиды с примесной разупорядоченно-
стью. Состав, структура, фазовые превращения. Стрел-
каловский В. Н., Полежаев Ю. М., Пальгуев С. Ф.
М.: Наука, 1987. 157 с., ил.

фазов. превр.

Х. 1987, 19, № 20

Оксиды
металлов

1987

11 В25. Амфотерность оксидов металлов. A fém-oxidok amfotériája. Szalay Tibor. «Kem. tan.», 1987, 26, № 3, 71—73

Популярное изложение теории амфотерности, основанное на материалах методологич. статей Lewis J. I., Anthony C. «Educ. in Chem.», 1986, 116, Rich R. L. «J. Chem. Educ.», 1985, 62, 44. Ю. Е. Ильичев

Х. 1988, 19, N11

Оксиды

1987

21 Б2004. Данные по тепловому расширению.
Часть 11. Сложные оксиды, A_2BO_5 и гранаты. Thermal
expansion data. XI. Complex oxides, A_2BO_5 , and the
garnets. Taylor D. «Trans. and J. Brit. Ceram.»,
1987, 86, № 1, 1—6 (англ.)

тепловое
расширение

(обзор)

Обзор. Данные о т-рой зависимости параметров решетки a , b и c и объема элементарной ячейки обработаны методом регрессионного анализа и представлены в виде $v-v_0(1+x_1T+x_2T^2)$. Приведены значения коэф. v_0 , x_1 , x_2 станд. отклонения и коэф. корреляции. В число рассмотренных материалов вошли андалузит, кианит, силлиманит, муллит, ставролит, оксиды с псевдобрукитовой структурой и гранаты. Библ. 69.

Л. П. Карпиловский

Х. 1987, 19, N 21

Титанина
мнка
оксида

(DM. 27361)

1987

Wang Zhi-Chang,

J. Phys. Chem. Solids,

1987, 48, N6, 527-533.

Thermodynamics of Non stoichiometric
Chemical Mu • component

Uranium Oxides.

Двойные
окислы

1987

' 107: 103946v Prediction of thermodynamic functions of binary oxides at high temperature for the inorganic thermodynamic chemistry database. Zhu, Jianzhong; Chen, Bin; Xu, Hua; Chen, Nianyi; Wang, Leshan; Xu, Zhihong (Inst. Metall., Acad. Sin., Shanghai, Peop. Rep. China). *Jinshu Xuebao* 1987, 23(1), A57-A62 (Ch). Math. models for estg. thermodyn. functions of binary oxides at high temp. were developed. Values of 4 thermodyn. functions of some compds. at different temps. were predicted. Root mean-square errors are of the same order as the exptl. errors.

термод. ф-ции

С. А. 1987, 107, N 12

Геохимия
Оксидов

1987

/107: 103931m The prediction of high temperature properties of complex oxides for Inorganic Thermodynamic Chemistry Database (ITDB). Chen, Nianyi; Zhu, Jianzhong; Xu, Hua; Xu, Zhihong; Wang, Leshan; Qi, Qiping; Chen, Bin (Shanghai Inst. Metall., Acad. Sin., Beijing, Peop. Rep. China). *Proc. Int. CODATA Conf. 1986* (Pub. 1987). 10th (Comput. Handl. Dissemination Data), 265-9 (Eng). Math. models are developed for estg. thermodyn. functions of complex oxides at high temp. According to these models, the values of four thermodyn. functions (heat capacity, entropy, free energy, and heat of formation) of some inorg. compds. at different temps. are predicted. Their mean square root deviations are close to the exptl. deviation.

(неприн-
сб-ба)

C.A. 1987, 107, N 12

(coll. opus.)

Двоённые
окиси с SiO_2

1988

108: 138840d Concentration dependences of the heat capacity of binary glasses based on silicon dioxide at low temperatures. Aliev, N. N.; Abdullaev, A. B.; Shalumov, B. Z.; D'yakonov, S. S. (Inst. Fiz., Baku, USSR). *Izv. Akad. Nauk SSSR, Neorg. Mater.* 1988, 24(1), 124-32 (Russ). Adiabatic calorimetry was used to det. the heat capacity dependence on concn. of several binary oxide glasses contg. SiO_2 . Thermodyn. parameters were calcd. at 5-300 K.

(мрмр
св-ва)

с. А. 1988, 108, N 16

Оксиды

1988

23 Б2193. Термодинамические особенности высоко-
температурной кристаллизации оксидов. Арзума-
н я н Г. А. «Физ. кристаллиз.» Калинин, 1988, 53—67

X. 1988, N 23

Оксиды
металлов

1988

(сверхпроводники)

1988: 140536y Heat capacity of metal oxide superconductors at low temperatures. Babushkina, N. A.; Inyushkin, A. V.; Kopylov, A. V.; Ozhogin, V. I. (USSR). *Sverkhprovodimost, Moskva* 1987, 5-32 (Russ). From *Ref. Zh., Fiz. (A-Zh.)* 1988, Abstr. No. 3N417. Title only translated.

(Cp)

C. A. 1988, 109, N 16.

(all. opm.)

Окислы

1988

110: 45982c Phase Diagrams of High-Melting Oxides: Handbook,
no. 5, Binary Systems, Pt. 4. (Diagrammy Sostoyaniya Sistem
Tugoplavkikh Oksidov: Spravochnik, Vyp. 5, Dvoinye Sistemy, Ch.
4) Galakhov, F. Ya.; Editor (Nauka, Leningradskoe Otd.:
Leningrad, USSR). 1988. 348 pp. (Russ) rub 1.60.

фазовые
диаграммы

высокотемпературные

с.А. 1989, 110, №6

Оксиды металлов

1988

5 Б3034. Термодинамика растворов нестехиометрических оксидов металлов. Solution thermodynamics for nonstoichiometric metal oxides / Young David J., Gesmund Francesco // High Temp.— High Pressures.— 1988.— 20, № 1.— С. 1—8.— Англ.

Уравнение Гиббса — Дюгема применено к бинарным нестехиометрич. оксидам металлов, к-рые рассматриваются или как р-ры их элементов, или как смеси выбранного станд. оксида с избыточным кол-вом одного из компонентов, или, наконец, как комбинация различных типов решетки, существующих в кристалле. Показано, что все эти формы точно эквивалентны друг другу и полностью самосогласованы. Ур-ние Гиббса — Дюгема для чистого оксида должно учитывать отклонение от стехиометрии и позволяет рассчитать активность металла и оксида как ф-цию активности кислорода, если используются эксперим. данные об отклонении от сте-

Х. 1989, № 5

хиометрии. Обычная простая форма констант равновесия, к-рая применяется для чистых стехиометрич. соединений, является приближением к истинной константе равновесия, к-рая должна учитывать отклонение от стехиометрии и ее влияние на активности как металла, так и оксида. Такое же рассмотрение м. б. применено и к тв. р-рам оксидов. Однако в этом случае активности оксида и металл. компонентов будут зависеть как от активности кислорода, так и от состава оксида.

В. Ф. Байбуз

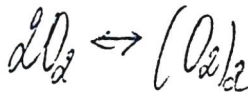
Окислительные
технологии

1989

112. 12667s Thermodynamic study of nonstoichiometric oxides by high-temperature microcalorimetry. Gerdanian, P. (Lab. Composes Non Stoechiometr., Univ. Paris-Sud, Orsay, Fr.). *Adv. Solid-State Chem.* 1989, 1, 225-53 (Eng). A review with 69 refs. on the use of microcalorimetry in the study of nonstoichiometric oxides. The heats of formation can be obtained with great accuracy. Comparison between theor. and exptl. values were made and defects structures in these materials are discussed.

(ΔH_f)

C.A. 1990, 112, N 2



1989

111: 221846t The role of oxygen dimer in oxygen photolysis in the Herzberg continuum: a temperature dependence study. Horowitz, A.; Schneider, W.; Moortgat, G. K. (Atmos. Chem. Div., Max Planck Inst. Chem., D6500 Mainz, Fed. Rep. Ger.). *J. Phys. Chem.* 1989, 93(23), 7859-62 (Eng). The effect of temp. on O_3 formation in the 214-nm photolysis of O was investigated as a means of assessing the role of O dimer in the photodissocn. of O excited in the Herzberg continuum. Throughout the entire temp. range of 297-387 K, evidence was found for the importance of $(O_2)_2$ in photolysis. For the reaction $2O_2 \rightleftharpoons (O_2)_2$ a ΔH value of -0.2 ± 0.4 kcal mol⁻¹ is estd. This result indicates that $(O_2)_2$ is a very weakly bound metastable dimer, the formation of which nevertheless has a pronounced effect on O absorption cross sections in the Herzberg continuum.

(ΔH)

C.A. 1989, 111, N24

Описание (к)

1989

Библиография (к)

111: 161615e Assessed high-temperature thermochemical data on some solids. Saxena, S. K.; Zhang, J. (Dep. Geol., Brooklyn Coll., Brooklyn, NY 11210 USA). *J. Phys. Chem. Solids* 1989, 50(7), 723-7 (Eng). From the available thermochem. data on eight oxides and silicates, complete sets of data on heat capacity, isobaric thermal expansion, isothermal compressibility, and Gibbs free energy of formation were generated by using an optimization technique. These data are made internally consistent and satisfy the relationship between the heat capacity at const. pressure and const. vol., thermal expansion and bulk modulus. The data can be extrapolated to temps. beyond melting as are needed in high pressure phase equil. calcs.

$\Delta_f G$

□

④

C.A. 1989, 111, N18

Библиография (к)
($\Delta_f G$)

Тугоплавкие
Оксиды

1989

21 Б3133 К. Тугоплавкие оксиды и их соединения в тонком слое / Сергеев А. Н. — Томск: Изд-во ун-та, 1989. — 298 с.: ил. — Рус.

Рассмотрены твердофазные превращения тугоплавких оксидов и их соединений в приповерхн. слоях и конденс. Пл с преимущественно диэлектрич. св-вами. Показано, что изменения хим. состава, вызванные близостью Пв и сопровождаемые обеднением по анионной подрешетке в приповерхн. слое, аналогичны условиям пленочной технологии образующегося кислородного соединения. Возможные пути и поведение продуктов твердофазных превращений рассмотрены на примерах окисления в различных средах, р-рения и инициируемого разложения под действием энергетич. потоков. Значит. внимание уделяется ионообм. р-циям и локализации протекающих процессов. Резюме

Х. 1989, № 21

Оксиды

1989

10 E470 K. Тугоплавкие оксиды и их соединения в тонком слое / Сергеев А. Н.— Томск: Изд-во ун-та, 1989.— 298 с.: ил.

Рассмотрены твердофазные превращения тугоплавких оксидов и их соединений в приповерхн. слоях и конденсированных пленках с преимущественно диэлектрич. свойствами. Показано, что изменения химич. состава, вызванные близостью поверхности и сопровождаемые обеднением по анионной подрешетке в приповерхн. слое, аналогичны условиям пленочной технологии образующегося кислородного соединения. Возможные пути и поведение продуктов твердофазных превращений рассмотрены на примерах окисления в различных средах, растворения и инициируемого разложения под действием энергетич. потоков. При этом значительное внимание уделяется ионообменным реакциям и локализации протекающих процессов.

Резюме

фр. 1989, N 10

Оксиды

1990

2 Б3001. Прецизионная калориметрия и прогнозирование свойств оксидов / Чачанидзе Г. Д.— Тбилиси: Мецниереба, 1990.— 192 с.: ил.— Рус.

Х. 1991, №2

Термодинамика
св-ва оксидов

1990

13 Б2007. Термодинамические и кристаллохимические свойства скандия, иттрия, лантана, лютеция и их оксидов / Резницкий Л. А. // Ж. физ. химии.— 1990.— 64, № 2.— С. 561—563.— Рус.

Нек-рые особенности термодинамич. св-в сходных элементов подгруппы скандия и их оксидов проанализированы с учетом кристаллохим. описания их строения.
Из резюме

х. 1990, № 13

Воздух

Госавзел Р.Т. 1990

8 И7. Описание термодинамических свойств воздуха. II. Функции оценки давления и плотности для линий выпадения росы и образования пузырьков. A thermodynamic property formulation for air. II. Pressure and density estimation functions for the dew and bubble lines / Jacobsen R. T., Clarke W. P., Beyerlein S. W., Rousseau M. F., Van Pollen L. J., Rainwater J. C. // Int. S. Thermophys.— 1990.— 11, № 1.— С. 179—187.— Англ.

термодинамическая св-ва

Описаны корреляции свойств линий появления первого пузырька (ЛППП) и росы (ЛР) для воздуха, состоящего из 78,12 мол. % N_2 , 20,96 мол. % O_2 и 0,92 мол. % Ar, выведенные с помощью модели, развитой в предыдущей статье. Рассмотрена форма кривых ЛППП и ЛР вблизи критич. точки жидкого воздуха, и модифицирована теория Ленга-Гриффитса для описания тройной смеси аргон-кислород-азот. Проведена оценка точности этих корреляций при помощи сравнения вычисленных свойств с данными других источников. Библ. 24. С. Е. Песчаный

ф. 1990, № 8

Термодинамические
свойства
воздуха

1990

4 И11. Предварительная формулировка термодинамических свойств воздуха для состояний от линии за-
жигания жидкое до 873 К или давлениях до 47 МПа.
A provisional thermodynamic property formulation for
air for states from the freezing liquid line to 873 K
with pressures to 70 MPa / Jacobsen R. T., Clarke W. P.,
Beyerlein S. W. // Adv. Cryog. Eng. Vol. 35. Pt B.
Proc. Cryog. Eng. Conf., Los Angeles, Calif., July 24—
28, 1989.— New York; London, 1990.— С. 1521—1531.—
Англ.

ф. 1992, № 4

Bozgyac

1990

115: 16453g. A provisional thermodynamic property formulation for air for states from the freezing liquid line to 873 K with pressures to 70 MPa. Jacobsen, R. T.; Clarke, W. P.; Eeyerlein, S. W. (Coll. Eng., Univ. Idaho, Moscow, ID USA). *Adv. Cryog. Eng.* 1990, 35(Pt. B), 1521-31 (Eng). A provisional thermodyn. property formulation for air based upon new exptl. data is presented. The new formulation is valid for tempa. from 65 to 875 K at pressures to 70 MPa and is based upon new measurements of the d. and isochoric heat capacity of liq. air recently completed at the National Institute of Stds. and Technol. in Boulder, Colorado. This formulation represents a significant improvement over previous formulations, particularly for calcn. of properties of liq. air. Sep. equations for the calcn. of dew and bubble point properties of air from prior work were incorporated in the development of a new fundamental equation of state explicit in Helmholtz energy. The equation of state was developed using a least-squares fitting procedure which has recently been adapted for application to air. The accuracy of properties calcd. using the new thermodyn. property formulation is established by comparison to selected exptl. data for air.

непривязан
CB - BA

C.A. 1991, 115, N 2

Оксиды

1991

24 В22. Влияние воды на свойства оксидов и оксидных материалов / Асланов Л. А. // Ж. неорганич. химии.— 1991.— 36, № 10.— С. 2593—2607.— Рус.

На многочисленных примерах рассмотрено влияние примеси воды на св-ва оксидов металлов и оксидных материалов, используемых в химич. аккумуляторах электрич. энергии, сенсорах горючих и взрывоопасных газов, твердотельной электронике, детекторах излучения, а также в кач-ве электродов электролизеров или оксидных КТ. Сделан вывод о необходимости контроля за вз-нием паров воды с оксидными материалами современной техники.

Х. 1991, № 24

1991

Хим. связь и
превращения
ОКСИДОВ

14 БЗ008. Химическая связь и превращения оксидов
/Резницкий Л. А. — М. :Изд-во ун-та, 1991. —165 с. —Рус.
Рассмотрены модели хим. связи в оксидах металлов,
основанные на особенностях ближайшего кислородного
окружения катионов, и анализируются причины возникно-
вения метастабильных состояний оксидов и возможности
термодинамич. методов их исследования. Приведены ко-
личественные корреляции между структурными и термо-
хим. св-вами сложных оксидов, позволяющие вычислять эн-
тальпии и энтропии образования соединений.

Х. 1993, № 14

Oklesak

1991

Sperak N.D., Sperak A.N.
et al.,

Oklesak
(ΔfK)

Ukr. Khim. Zh. (Russ. Ed.)
1991, 57(9), 914-19

(all. KNO $\bullet$ mer; I)

6 Б3003. Пакет диалоговых вычислительных программ для расчета термодинамических свойств влажного воздуха. An interactive software package for the calculation of the thermodynamic properties of moist air /Ulen Neal E., Penoncello Steven G., - Jacobsen Richard T. //12th IUPAC Conf. Chem. Thermodyn. [and] Jt Meet. 47th Calorim. Conf., Snowbird, Utah, 16—21 Aug., 1992: Program, Abstr., and Repts. —S. l., [1992] .—С. 171 .—Англ.

Предложен пакет диалоговых вычислит. программ для расчета термодинамич. св-в влажного воздуха в интервале т-р 173,15—473,15 К для давл. до 15 МПа. Вычислит. программы позволяют рассчитать таблицы св-в влажного воздуха вдоль линий постоянной относит. влажности, т-ры по сухому и влажному термометрам, энтальпию и уд. объем. В. Ф. Байбуз

Термодинам. св-ва
оксидов

1993

10 БЗ006. Компьютерное исследование структуры и термодинамических свойств оксидов гомологического ряда Me_2O_3 /Белашенко Д. К. //Ж. физ. химии. — 1993. — 67, № 1. — С. 5—12. — Рус.

Методами непрерывной статич. релаксации и молек. динамики построена серия аморф. и жидк. моделей оксидов M_2O_3 с парными ПТ Борна-Майера, отличающимися величиной ПТ отталкивания ионных оболочек частиц M^{3+} и O^{2-} . Рассмотрены модели, состоящие из 500 ионов; нек-рые модели отвечали реальным объектам (V_2O_3 , Al_2O_3 , Fe_2O_3), а остальные — гипотетич. оксидам. Показано, что при уменьшении ПТ отталкивания ионных оболочек $\text{M}^{3+} - \text{O}^{2-}$ происходит переход от плотных некрист. структур к структурам с пространственной случайной сеткой связей, а затем — к слоистой структуре; линейную структуру с ПТ Борна-Майера получить невозможно. Проанализированы структурные, топологич. и термодинамич. св-ва оксидов. Рассчитаны изменения энергии Гиббса и энтропии оксидов при движении вдоль гомологич. ряда.

Оксиды

Х. 1993, № 10

Оксиды

1993

5 Б2007. Теоретическое исследование некристаллических оксидов гомологического ряда МО /Белащенко Д. К. //Неорган. тер. .—1993 .—29 ,№ 7 .—С. 941—948 .—Рус.

Методами молек. динамики и непрерывной статич. релаксации с использованием ЭВМ построены теор. модели жидк. и аморф. оксидов ряда МО ($M = Mg, Fe, Ca, Sr, Ba$). Моделирование проведено на примере кубич. кластера из 216 ионов в приближении чисто ионной связи. ПТ парных вз-вий выбраны в форме Борна-Майера: $\rho_{ij} = Z_i Z_j e^2 / r + B_{ij} \cdot \exp(r / \rho_{ij})$. Допущения: $\rho_{ij} = 29$ пм, $B_{11} = 0$, $B_{22} = 1500$ эВ. При этом B_{12} оказывается определяющим параметром модели, однозначно связанным с радиусом M^{2+} . Вычислено миним. значение B_{12} для МО. Модели строились при 0 К и 2000 К. Кратко обсуждено влияние т-ры и давл. Для всех моделей рассчитаны структурные х-ки (r_{ij}), распределение КЧ катионов и их средние КЧ и т. д.), топологич. параметры и термодинамич. ф-ии: энергия Гиббса, теплоемкость, энтропия, а также различные вклады в энергию системы. Вычислены молярные объемы моделей.

А. Р. Оганов

X. 1994, N5

Неорганические оксиды

1993

✓ 18 Б3056. Сложные оксиды, содержащие одно-, двух- и трехзарядные катионы и тетраэдрический анион /Кожевникова Н. М. //Ж. неорганической химии. — 1993. — 38, № 5. — С. 747—752. — Рус.

Проведена систематизация более 350 тройных арсенатов, ванадатов, фосфатов, силикатов, сульфатов и молибдатов, кристаллизующихся в 20 структурных типах. Определен средний ионный радиус катионов ($r_{\text{ср}}$), включая ионный радиус элемента (Э), формирующего тетраэдрический анион ЭO_4 . Найдены пределы изменения $r_{\text{ср}}$ для каждой структурной группы.

X. 1993, N 18

Кучак

1993

120: 150601g Analysis of thermodynamic properties for high-temperature superconducting oxides. Kushwah, S. S.; Shanker, J. (Dep. Phys., Inst. Basic Sci., Agra, 252004 India). *Phys. Status Solidi B* 1993, 180(1), 183-8 (Eng). Anal. of thermodyn. properties such as sp. heat, Debye temp., Einstein temp., thermal expansion coeff., bulk modulus, and Gruneisen parameter is performed for rare-earth-based, ~~Ti-based~~, and Bi-based superconducting copper oxides. Values of thermodyn. parameters are calcd. and reported. The relationship between the Debye temp. and the superconducting transition temp. is used to est. the values of T_c using the interaction parameters from Ginzburg.

(перевод
сб-ба)

C.A. 1994, 120, N 12

Оксиды

Ож. 37077

1993

№ 16 Б3028. Масс-спектральный метод исследования областей гомогенности оксидов /Марушкин К. Н., Алиханян А. С. //Докл. АН (Россия) .— 1993 .— 329 ,№ 4 .— С. 452—454 .— Рус.

(Кр)

Х. 1993, № 16

Аморфные
оксиды

1993

1) 6 Б2343. Ингибиторы кристаллизации аморфных оксидов /Резницкий Л. А., Филиппова С. Е. //Вестн. МГУ сер. 2 .—1993 .—34 ,№ 3, 2 .—С. 203—221 .—Рус.

Обзор. Обобщены публикации авторов с привлечением лит-рных данных за последние 10 лет, в к-рых приведены эксперим. результаты изучения т-рной стабилизации рентгеноморф. оксидов и их тв. р-ров. Исследованы процессы кристаллизации аморф. оксидов с образованием простых оксидов, тв. р-ров и хим. соед. с различным полиэдрич. строением. Установлены энергетич. и кристаллохим. критерии подбора легирующих компонентов-ингибиторов, стабилизирующих аморф. состояние, определены т-ры и энтальпии кристаллизации аморф. оксидов, проведена проверка нек-рых положений теории изоморф. смесимости. С целью выявления общих критериев стабилизации некрис- состояния тв. тел выбирались оксиды с разной крист. структурой и разными энергиями связей металл — кислород.

Х. 1994, № 6

Оксиды

1993

18 Б3028. Энтальпийная стабилизация некоторых сложных оксидов /Резницкий Л. А. //Неорган. матер. .—1993 .—29 ,№ 3 .—С. 386—389 .—Рус.

Приближенными методами расчета, основанными на учете энтальпий изменения КЧ катионов в кислородном окружении, вычислены энтальпии образования нек-рых сложных оксидов из простых. Энтальпийная стабилизация координац. сложных оксидов по отношению к простым оксидам во многих случаях определяется экзотермич. эффектами изменения КЧ крупных ионов щел.-зем. металлов и лантана.

X. 1993, N 18

Оксиды

1994

поливалентный
элемент

852289. Термодинамика взаимодействия оксидов поливалентных элементов в расплавах стекол с кислородом // Булер П., Вайсман Р. // Физ. и химия стекла. — 1994. — 20, № 2. — С. 227—238. — Рус.

Проанализированы две модели взаимодействия ионов поливалентных элементов с кислородом: ионная и молек. Показано, что выводы, след. из ионной модели, относительно влияния концентрации поливалентных ионов и основности расплава на равновесие не согласуются с опытом. Хорошее согласие с опытом дает молек. модель взаимодействия оксидов поливалентных элементов с кислородом $\text{Red} + \frac{n}{2} \text{O}_2 = \text{Ox}$, где Red, Ox — восстановленная и окисленная формы оксида, n — прирост валентности иона поливалентного элемента. Также показано, что ионы кислорода расплава не могут непосредственно участвовать в хим. реакции.

X.1995, N8

Джессак
Меморанд

1994

121: 142866c Determination of enthalpies of volatilization for metal oxides/nitrides using chemical equilibrium combustion temperature calculations. Glassman, Irvin; Papas, Paul (Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Princeton University, Princeton, NJ 08544 USA). *J. Mater. Synth. Process.* 1994, 2(3), 151-9 (Eng). Chem. equil. calcs. of the temp. and product compn. of metal-oxygen/nitrogen systems as a function of the original enthalpy content of the reacting species has provided a means of calc. the enthalpies of decompn. and volatilization of metal oxides and nitrides. A limiting reaction temp. independent over a range of the original enthalpy content was found for all systems examd. This limiting temp. has been designated a pseudo-b.p. Since, during decompn., some systems have products that are in the condensed phase, two limit temps. are found, that assoc. with the decompn. process and that assoc. with the enthalpy input when all decompn. products are volatilized. The data calcd. should be of value for self-propagating high-temp. synthesis processes.

(SVH)



(4)

C.A. 1994, 121, N12

Хемпел Меморанд
(суд. opinion)

Оксиды

1994

18 Б3045. К вопросу о химической активности оксидов тяжелых цветных металлов /Мечев В. В. //Металлы .—1994 .—№ 1 .—С. 41—45 .—Рус.

Проведены исследования и обсуждаются результаты по вз-вию тв. оксидов тяжелых цветных металлов с серой и углеродом. Установлена прямая зависимость хим. активности оксидов от разупорядочения их крист. решетки при нагревании. Начало вз-вия в изучаемых системах сопровождается изменением типа проводимости оксидов.

Кр

Х. 1994, № 18.

182 Summary
OKCija

1994

121: 118813n Estimation of the standard enthalpies of formation of complex oxides. Zhang, Hengzhong (Cent. South Univ. Technol., Changsha, Peop. Rep. China 410053). *Youse Jinshu* 1994, 46(1), 41-4 (Ch). A novel equation was put forward to est. the enthalpies of formation of complex oxides: $\Delta_f H_m^\circ = \sum_i a_i \Delta_f H_{m,i}^\circ + \sum_i a_i A_i + \sum_{i < j} a_i a_j (A'_i + A'_j) / \sum_i a_i$ and the characteristic parameters, A and A' , of 32 usual simple oxides were optimized by the literature data of enthalpies of 152 binary complex oxides. This equation is applicable for estn. of unknown std. enthalpies of formation of binary complex oxides, it can also be employed to deduce the enthalpy data of ternary complex oxides with satisfaction.

($\Delta_f H$)

C.A. 1994, 121, N10



(all numerical)

Oluente

1995

123: 18361m Modeling of structural, elastic, dynamical and thermodynamic properties of oxides. Keskar, Nitin Ramesh (Univ. of Minnesota, Minneapolis, MN USA). 1994. 128 pp. (Eng). Avail. Univ. Microfilms Int., Order No. DA9508947. From Diss. Abstr. Int. B 1995, 55(11), 4918.

(метрол-св-ба)

C. A. 1995, 123, N 2

OKUCATE

1995

122: 275392n Calculation of the enthalpies of formation of some mixed coordination oxides. Reznitskii, L. A. (Moscow State Univ., Moscow, Russia 119899). *Inorg. Mater. (Transl. of Neorg. Mater.)* 1995, 31(3), 333-5 (Eng). The heats of formation of mixed-coordination oxides from the constituent oxides were calcd. by applying the methodol. developed earlier (1993). The heats of formation at 298 K of the constituent oxide as found in the literature were used in these calcns.

(ASH)

C.A. 1995, 122, N 22

(all. 8mm.)

Okucate

1996

124:326370e Enthalpy stabilization of some perovskite-like oxides. Reznitskii, L. A. (Moscow State Univ., Moscow, Cuba 119899). *Inorg. Mater. (Transl. of Neorg. Mater.)* 1996, 32(4), 397-402 (Eng). The enthalpies of formation of perovskite-like mixed oxides were calcd. by an approx. procedure. The enthalpy stabilization of these compds. is assocd. primarily with exothermic effects due to the change in coordination of large cations present on cuboctahedral sites of the perovskite-type structure.

($\Delta_f H$)

C. A. 1996, 124, N 24

Двойные
окислы

1997

128: 275816c A new method of standard increment calculation of double oxides enthalpy within the interval of 0-298.15K. Tsagareishvili, D.; Gvelesiani, G.; Ukleba, K.; Baratashvili, I.; Omiadze, I.; Nadiradze, A. (P. Tavadze Inst. of Metallurgy, Georgian Acad. of Sci., Georgia). *Bull. Georgian Acad. Sci.* 1997, 156(2), 249-252 (Eng), Georgian Academy of Sciences. A new equation is deduced for the calcn. of std. increment ($H_{298} - H_0$) of double oxides within the interval 0-298.15K. By this equation the computer program is elaborated. It allows from exptl. data concerning ($H_{298} - H_0$) different classes of double oxides to calc. such values of this function for the studied matter. The exactness of calcn. makes ± 20 cal/g.atom.

$H_{298} - H_0$

CA. 1998, 128, V22

1997

Двойные
окислы

Equation are presented.

128: 275815b New method of calculation of standard heat capacities of double oxides. Ukleba, K.; Gvelesiani, G.; Baratashvili, J.; Tsagareishvili, D.; Omiadze, J.; Nadiradze, A. (Georgia). *Bull. Georgian Acad. Sci.* 1997, 156(1), 66-69 (Eng), Georgian Academy of Sciences. The new method of calcn. of std. heat capacities (C_{p298}) of double oxides was worked out. The basis of it is the presence of the exptl. data on C_{p298} for different classes of these compds. The values of C_{p298} for >120 compds. of this class are calcd. The anal. of the av. relative deflection of the calcd. and exptl. values of C_{p298} for the studied double oxides make approx. $\pm 3.0\%$.

C_{p298}

C.A. 1998, 128, N22

(calc. open.)

Геохимические данные

1998

130: 173649z A new method of the calculation of standard enthalpy of formation of double oxides. Nadiradze, A.; Ukleba, K.; Gvelesiani, G.; Baratashvili, J.; Tsagareishvili, D.; Omiadze, J. (F. Tavadze Inst. Metallurgy, Georgian Acad. Sci., Georgia). *Bull. Georgian Acad. Sci.* 1998, 157(3), 424-427 (Eng), Georgian Academy of Sciences. The new equation for calcg. the std. enthalpy of formation of double oxides from simple oxides was derived on the basis of exptl. data of ΔH°_{298} for various classes of double oxides.

(метод
расчета
 $\Delta_f H$)

C.A. 1999, 130, N13

Abou Khe
OKU CAH

1998

128: 313544x Estimation of the standard enthalpy of formation of double oxide. Zhuang, Weidong; Liang, Jingkui; Qiao, Zhiyu; Shen, Jianyun; Shi, Ying; Rao, Guanghui (Institute of Physics and Centre of Condensed Matter Physics, Chinese Academy of Sciences, P.O. Box 603, Beijing, Peop. Rep. China 100080). *J. Alloys Compd.* 1998, 267(1-2), 6-10 (Eng), Elsevier Science S.A.. A new estg. method for the std. enthalpy of formation of double oxide at 298.15 K is proposed. The std. enthalpy of formation can be obtained by adding the reaction enthalpy of the simple oxides combining into a double oxide to the sum of the std. enthalpies of formation of the simple oxides. When the reaction enthalpy relates to one mole of two simple oxides combining into a double oxide, the reaction enthalpy (ΔH°) can be predicted from a term, $x_1 x_2 \lambda$, where x_1 and x_2 are the mole fractions of the two simple oxides, and λ is a const. If ΔH° is known for one double oxide, λ can be calcd. Then, ΔH° of other double oxides formed from these two simple oxides can be predicted. If no ΔH° values is known, λ can be estd. from the electronegativities of the component elements.

($\Delta_f H$)

CA. 1998, 128, N28

0-oxidiz

2000

F: MeO

P: 1

132:256169 Periodic table of the oxides.

Cvetkovic, Katarina; Petric, Ant Dept.
of Materials Science and Engineering, McMaster
University Hamilton, ON, Can. Am. Ceram.
Soc. Bull., 79(4), 65-69 (English) 2000 Two
comprehensive periodic tables of metal oxides are
proposed. The first table gives the cation radii
and the thermal and elec. conductivities. The second
table gives data on mol. mass, d., m.p., free
energy of formation, base strength and crystal
structure of the oxides.

C.A. 2000, 132

F: MO

P: 1

134:257370- Ab Initio Calculation of Phase Diagrams of Oxides.
Lavrentiev, M. Yu.; Allan, N. L.; Barrera, G. D.; Purton, J. A. School
of Chemistry, University of Bristol, Bristol, UK. J. Phys. Chem, B
(2001), 105(17), 3594-3599. in English.

Monte Carlo simulations with the explicit interchange of
cations, the semigrand-canonical ensemble and configurational bias
techniques, was used to calc. phase diagrams for oxides, including both
solid and liq. phases. We illustrate our approach with the system
CaO/MgO where our techniques take full account of local structural
distortion and clustering due to the large mismatch between the sizes of
the two cations. All the characteristic features of the MgO/CaO phase
diagram, including the eutectic point and the regions of liq.-solid
coexistence, are reproduced.

2001

OKUCMH

2001

135: 309147x Ab initio study on B, Al, or Ga isomorphously substituted mordenites. Yuan, Shu-Ping; Wang, Jian-Guo; Li, Yong-Wang; Peng, Shao-Yi (State Key Lab. of Coal Conversion, Inst. of Coal Chem., Chinese Acad. of Sci., Taiyuan, Peop. Rep. China 030001). *Wuli Huaxue Xuebao* 2001, 17(9), 811-816 (Ch), Beijing Daxue Chubanshe. Substitution of B, Al or Ga into the mordenite framework and position of the bridging hydroxyl group are studied by using ab initio Hartree-Fock methods. Energetically, heteroatoms including B, Al or Ga prefer the T₃ and T₄ sites in mordenite framework. For Al and Ga substituted in the T₄ site, the charge-compensating proton prefers to attach to O₁₀; and for B in the T₄ site, the proton prefers to bond with O₂ or O₁₀, both O₂ and O₁₀ atoms are located on the wall of the largest channel. Proton affinities are calcd. and indicate that Bronsted acidity of isomorphously substituted mordenite increases in the order: B-MOR < Ga-MOR < Al-MOR.

C.A. 2001, 135, N21