

РАСТВОРИМОСТЬ ПРИМЕСЕЙ В МЕТАЛЛАХ, СПЛАВАХ, ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ, ФУЛЛЕРИТАХ

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие рецензента.....	9
От авторов.....	11
ПРЕДИСЛОВИЕ.....	13
Литература к предисловию.....	23
ГЛАВА I. РАСТВОРИМОСТЬ ПРИМЕСЕЙ ВНЕДРЕНИЯ.....	27
1. ПРИМЕСЬ ВНЕДРЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ ГПУ СТРУКТУР.....	28
Сплавы типа NiAs и MnP.....	29
Сплавы типа MgCd.....	37
Сплавы типа Ni ₃ Sn.....	44
Общая формула растворимости примеси внедрения в сплавах АВ-С _{ВН} и АВ ₃ -С _{ВН}	49
Сравнение теории с экспериментальными данными....	53
Литература к разделу 1.....	60
2. РАСТВОРИМОСТЬ АДсорбированного ВОДОРОДА НА ГРАНИ (0001) КРИСТАЛЛА С ГПУ РЕШЕТКОЙ АЗ.....	65
Свободная энергия.....	65
Уравнения равновесия.....	68
Расчет изотерм и изобар.....	70
Расчет изостер.....	76
Заключение.....	79
Литература к разделу 2.....	80
3. РАСТВОРИМОСТЬ ВОДОРОДА В СПЛАВАХ- НАКОПИТЕЛЯХ СТРУКТУРЫ D2d И ДРУГИХ МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ.....	83
Постановка задачи.....	84
Термодинамический потенциал. Уравнения равновесия. Растворимость водорода.....	86
Обсуждение результатов. Сопоставление с экспериментом.....	90
Изотермы растворимости водорода в фазах постоянного состава.....	91
Изотермы растворимости водорода в трех- компонентной матрице переменного состава.....	95
Изоплеты растворимости водорода.....	98
Изоплеты растворимости газов в металлах и сплавах произвольной структуры и любого состава.....	102
Заключение.....	107
Литература к разделу 3.....	108

4. ВОДОРОД В ФУЛЛЕРИТАХ.....	113
Свободная энергия ПК и ОЦК фаз.....	115
Температура фазового перехода ПКР→ОЦКР.	
Диаграмма состояния системы.....	119
Растворимость водорода в ОЦК фазе.....	123
Заключение.....	126
Свободная энергия ГЦК гидрофуллерита. Уравнения равновесия.....	126
Растворимость водорода в однокомпонентном фуллерите.....	133
Распределение атомов водорода в октаэдрических и тетраэдрических междоузлиях однокомпонентного фуллерита.....	134
Распределение атомов водорода по тригональным и бигональным междоузлиям однокомпонентного фуллерита.....	135
Малая концентрация атомов водорода в смешанном фуллерите Ф1 - Ф2.....	137
Зависимость растворимости водорода от состава фуллерита и температуры при распределении атомов водорода в междоузлиях тетраэдрических, тригональных и бигональных.....	144
Заключение.....	147
Литература к разделу 4.....	148
5. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ И ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМОВ ВОДОРОДА В МЕЖДОУЗЛИЯХ ТРЕХ ТИПОВ УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ СПЛАВОВ СТРУКТУРЫ L1 ₂ ...	157
Свободная энергия.....	160
Равновесное распределение атомов водорода.....	162
Растворимость водорода.....	167
Кинетика перераспределения атомов водорода.....	171
Заключение.....	178
Литература к разделу 5.....	179
6. ФОРМИРОВАНИЕ БИКОМПЛЕКСИЙ И КРАУДИОНОВ ВНЕДРЕНИЯ.....	183
Бикомплексии в сплаве.....	186
Расчет свободной энергии.....	186
Условия равновесного состояния сплава.	
Растворимость примеси.....	189
Анализ полученных результатов.....	190
Краудионы внедрения в сплавах.....	197

Свободная энергия сплава. Равновесное распределение атомов внедрения.....	198
Исследование энергетического состояния кристалла.....	201
Растворимость примеси внедрения.....	210
Заключение.....	216
Литература к разделу 6.....	217
7. НАЛИЧИЕ ДВУХ ПРИМЕСЕЙ ВНЕДРЕНИЯ. ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ ИХ РАСТВОРИМОСТЕЙ.....	221
Свободная энергия сплава.....	222
Уравнения термодинамического равновесия. Расчет растворимостей примесей.....	227
Растворимость примесей в неупорядоченном сплаве.....	228
Растворимость примесей в максимально упорядоченном сплаве.....	232
Температурная зависимость растворимости.....	236
Сопоставление результатов теории с экспериментальными данными.....	238
Заключение.....	243
Литература к разделу 7.....	244
8. ПРИМЕСИ В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ БОРИДА ЖЕЛЕЗА Fe₂B.....	247
Структура кристаллов (FeM) ₂ BC.....	248
Свободная энергия сплава.....	250
Растворимость бора и углерода.....	254
Анализ результатов расчетов.....	256
Литература к разделу 8.....	258
ГЛАВА II. ПРИМЕСЬ ЗАМЕЩЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ СТРУКТУР B₈ И A₁₅.....	261
9. РАСЧЕТ РАСТВОРИМОСТИ БЕЗ УЧЕТА КОРРЕЛЯЦИИ.....	262
Теория.....	262
Анализ полученных результатов.....	269
Растворимость примеси С в металле А.....	269
Растворимость примеси С в неупорядоченном сплаве АВ.....	271
Растворимость компонента С в металле А, содержащем примесь В малой концентрации... ..	272
Растворимость примеси С в упорядочивающемся сплаве АВ стехиометрического состава.....	274
Заключение.....	276
Литература к разделу 9.....	276

10. КВАЗИХИМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАСТВОРИМОСТИ....	279
Теория.....	279
Анализ уравнений растворимости. Сопоставление с экспериментальными данными.....	290
Растворимость примеси в металле.....	290
Растворимость примеси в неупорядоченном сплаве.....	293
Влияние примеси В к металлу А на растворимость компонента С.....	295
Влияние дальнего порядка на растворимость. Распределение примесных атомов на узлах....	297
Влияние корреляции на растворимость.....	300
Заключение.....	303
Литература к разделу 10.....	304
11. ВОДОРОД В УПОРЯДОЧЕННЫХ ФАЗАХ А15.....	307
Постановка задачи.....	308
Атомный порядок в сплаве A_3BC_x	311
Расчет растворимости примеси методом средних энергий.....	315
Расчет растворимости примеси методом конфигураций.....	316
Концентрационная зависимость растворимости примеси в неупорядоченном сплаве.....	318
Температурная зависимость растворимости примеси в неупорядоченном сплаве.....	322
Влияние порядка на растворимость примеси.....	323
Заключение.....	327
Литература к разделу 11.....	328
ГЛАВА III. ВЛИЯНИЕ ОБЪЕМНЫХ ЭФФЕКТОВ НА РАСТВОРИМОСТЬ.....	331
12. ПРИМЕСЬ ЗАМЕЩЕНИЯ В СПЛАВАХ ТИПА CsCl.....	331
Свободная энергия. Уравнения равновесия.....	331
Равновесная концентрация атомов примеси.....	335
Учет объемных эффектов.....	336
Растворимость примеси в неупорядоченном сплаве....	342
Растворимость примеси в упорядоченном сплаве.....	342
13. ПРИМЕСЬ ВНЕДРЕНИЯ В ГЦК СПЛАВАХ ТИПА Cu_3Au	345
Размещение примесных атомов в октамеждоузлиях....	346
Размещение примесных атомов в тетрамеждоузлиях....	353
14. ПРИМЕСЬ ВНЕДРЕНИЯ В ОЦК СПЛАВАХ.....	356

Примесь в сплавах типа CsCl.....	356
Примесь в сплавах типа F ₃ Bi.....	360
Заключение.....	362
Литература к разделам 12, 13, 14.....	363
ГЛАВА IV. ВЛИЯНИЕ ВСЕСТОРОННЕГО ДАВЛЕНИЯ НА РАСТВОРИМОСТЬ.....	365
15. СПЛАВЫ ЗАМЕЩЕНИЯ ТИПА CsCl.....	365
Растворимость в неупорядоченном сплаве.....	368
Влияние атомного порядка.....	370
Заключение.....	373
Литература к разделу 15.....	374
16. ВОДОРОД В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ.....	375
Теория.....	375
Сравнение теории с экспериментальными данными...	377
Литература к разделу 16.....	381
ГЛАВА V. ВЛИЯНИЕ МАГНЕТИЗМА НА РАСТВОРИМОСТЬ...	383
17. ПРИМЕСЬ ЗАМЕЩЕНИЯ.....	384
ГЦК сплавы типа Cu ₃ Au.....	384
ОЦК сплавы типа CsCl.....	397
Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными.....	406
Литература к разделу 17.....	411
18. ПРИМЕСЬ ВНЕДРЕНИЯ.....	417
Теория.....	418
Интерпретация результатов расчетов.....	424
Литература к разделу 18.....	428
19. ВЗАИМНОЕ ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИМОСТИ ТРЕТЬЕГО КОМПОНЕНТА И НАМАГНИЧЕННОСТИ В БИНАРНОМ ГПУ СПЛАВЕ СТРУКТУРЫ D8 ₅	431
Теория.....	433
Обсуждение результатов теории. Сопоставление с экспериментальными данными.....	438
Бинарный сплав A ₇ B ₆	439
Тройной сплав A ₇ B _{6-x} C _x	443
Определение растворимости примеси в зависимости от намагниченности.....	446
Заключение.....	449
Литература к разделу 19.....	452
20. ВЗАИМНАЯ РАСТВОРИМОСТЬ ФАЗ БИНАРНОГО РАСПАДАЮЩЕГОСЯ ФЕРРОМАГНИТНОГО СПЛАВА....	457

Теория.....	458
Температура распада. Температура Кюри.....	461
Температура взаимной растворимости фаз магнитного сплава.....	469
Литература к разделу 20.....	470
ГЛАВА VI. ДИПОЛЬНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ДВУМЕРНОМ ФУЛЛЕРИТЕ И РАСТВОРИМОСТЬ ЭНДОМЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ. РАССЛОЕНИЕ СМЕШАННОГО ФУЛЛЕРИТА C₆₀-C₇₀...	
21. РАСТВОРИМОСТЬ ЭНДОМЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ В ДИПОЛЬНОУПОРЯДОЧЕННОЙ МОНОПЛЕНКЕ ФУЛЛЕРИТА.....	473
Параметры дипольного порядка. Числа пар ближайших эндометаллофуллеренов.....	476
Свободная энергия пленки эндоэдралов.....	477
Уравнения термодинамического равновесия. Температура Кюри.....	479
Растворимость эндоэдралов.....	482
Заключение.....	486
Литература к разделу 21.....	487
22. КОНЦЕНТРАЦИОННЫЙ РАСПАД ТВЕРДОГО РАСТВОРА ФУЛЛЕРЕНОВ НА ФАЗЫ РАЗНЫХ СТРУКТУР.....	491
Сверхструктуры молекулярного кристалла.....	492
Расчет фуллереновых пар.....	494
Свободная энергия ромбоэдрической фазы.....	497
Свободная энергия простой кубической фазы.....	499
Оценка энергетических параметров смешанного фуллерита. Температура фазового расслоения. Диаграмма состояния.....	501
Равновесные концентрации фуллеренов в двухфазовом фуллерите.....	505
Заключение.....	509
Литература к разделу 22.....	510