

О Г Л А В Л Е Н И Е

	<i>Стр.</i>
Предисловие рецензента.....	9
От авторов	11
ГЛАВА I. Современные методы теоретических расчетов и методика экспериментальных исследований систем атомарный водород–металл.....	
1. Обсуждение методических подходов, используемых для интерпретации экспериментальных результатов при исследовании систем Ме-Н.....	15
Введение.....	15
Особенности образования и строения сплавов внедрения.....	16
Гетерогенные реакции.....	18
Топохимия реакций металл - водород.....	21
Влияние давления и температуры.....	25
Модель Пика-Зонненберга.....	27
Процессы на поверхности.....	30
Энергия активации диссоциации водорода на поверхности.....	32
2. Статистические теории исследования сплавов.....	36
Метод Горского-Брэгга-Вильяма.....	37
Метод дифференциальной геометрии.....	38
Квазихимический метод.....	39
Метод Кирквуда.....	40
3. Особенности подготовки экспериментальных образцов и методика их исследования при изучении систем атомарный водород - металл	41
Предварительная подготовка образцов	42
Реакционная система	42
Аналитические методы	43
Метод плазмохимической термогравиметрии	43
Экспериментальная установка	45
Кинетический метод исследования гидридообразования в переходных металлах.....	48
Литература к главе I	52
ГЛАВА II. Расчет растворимости компонента внедрения.....	
4. Растворимость примеси внедрения в сплаве АВ структуры B8 ₁ , B31.....	58

Расчет свободной энергии.....	58
Оценка растворимости.....	62
5. Примесь внедрения в сплавах структуры B19	66
Растворимость примеси в металле A.....	67
Бинарный сплав с малой концентрацией примеси.....	70
6. Примесь внедрения в сплавах AB ₃ ГЦК структуры L1 ₂ . Влияние примеси на энергетическое состояние сплава	72
Свободная энергия сплава	73
Равновесное распределение внедренных атомов.....	75
Исследование энергетических состояний кристалла.....	78
Растворимость примеси внедрения.....	87
Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными	91
7. Растворимость водорода в некоторых гидридообразующих сплавах и металлах	97
Структурные особенности	99
Термодинамический потенциал. Уравнение равновесия. Растворимость водорода	101
Обсуждение результатов. Сопоставление с экспериментом	103
Изотермы растворимости водорода в фазах постоянного состава.....	105
Изотермы растворимости водорода в трехкомпонентной матрице переменного состава	108
Изоплеты растворимости водорода в сплавах-накопителях.....	112
Изоплеты растворимости водорода в междоузлиях двух типов	117
8. Адсорбция водорода на рутении. Изостеры растворимости адсорбированного водорода.....	120
Свободная энергия поверхности кристалла. Уравнения равновесия. Растворимость адсорбированного водорода	121
Расчет изотерм и изобар	125
Расчет изостер	131
9. Взаимное влияние растворимости примесей внедрения.....	135
Свободная энергия сплава. Уравнения равновесия	136
Растворимость примесей внедрения в неупорядоченном сплаве	140
Растворимость примесей внедрения в максимально упорядоченном сплаве	144

Растворимость примесей внедрения G, D при разных температурах сплава АВ.....	146
Сопоставление результатов теории с экспериментальными данными.....	150
Литература к главе II.....	156

ГЛАВА III. Перераспределение атомов внедрения по поверхностным и объемным позициям.....	163
10. Температурное перераспределение внедренных атомов на свободной поверхности грани (111)	163
Энергии и концентрации атомов внедрения	164
Кинетические уравнения	166
Равновесное распределение внедренных атомов в металле	167
Равновесное распределение внедренных атомов в упорядочивающемся сплаве.....	168
Исследование кинетики перераспределения внедренных атомов в металлических пленках	170
Кинетика перераспределения атомов внедрения в пленках сплава АВ. Время релаксации процесса	174
Сопоставление расчетных формул с экспериментальными данными.....	178
11. Атомы внедрения в окта- и тетраэдрических междоузлиях ОЦК кристаллов со свободной поверхностью.....	183
Равновесное распределение атомов внедрения в кристалле с поверхностью грани (001).....	185
Влияние толщины кристалла на распределение атомов внедрения. Эффект поверхностной сегрегации	187
Атомы внедрения в кристалле с поверхностью грани (001). Время релаксации.....	190
Атомы внедрения в кристалле с поверхностью грани (111)	193
12. Поверхностное и объемное распределение атомов внедрения в металле под давлением.....	195
Объемный эффект, обусловленный давлением.....	196
Распределение внедренных атомов при больших числах заполнения	199
Учет объемных эффектов, обусловленных внедрением и давлением	202
Литература к главе III	206

ГЛАВА IV. Теоретические исследования фазовых превращений в металлогидридах.....	211
13. Атомное упорядочение в сплаве Nb ₃ Sn, инициируемое примесью водорода.	
Растворимость водорода	211
Постановка задачи.....	212
Атомный порядок в сплаве A ₃ B с примесью C	215
Растворимость примеси C в сплаве A ₃ B	221
Концентрационная зависимость растворимости примеси в неупорядоченном сплаве	223
Температурная зависимость растворимости примеси в неупорядоченном сплаве	227
Влияние атомного порядка на растворимость примеси в сплаве	228
Литература к главе IV	232
ГЛАВА V. Фазовые превращения в титане и цирконии при их взаимодействии с водородом.....	235
Введение.....	235
V.1. Теоретические расчеты.....	236
14. Превращения $\alpha \leftrightarrow \beta \leftrightarrow \gamma$ в титане и цирконии, инициируемые водородом	236
Свободная энергия α -фазы	238
Свободная энергия β -фазы	241
Свободная энергия γ -фазы	244
Анализ и обсуждение результатов расчетов свободных энергий α -, β -, γ -фаз. Построение фазовой диаграммы	247
15. Превращения $\gamma \leftrightarrow \delta \leftrightarrow \epsilon$ в гидридах титана и циркония	252
Теория	253
Анализ и обсуждение результатов.	
Построение фазовой диаграммы	258
Диаграмма состояния с учетом переходов α - β - γ - δ - ϵ	265
Литература к главе V.1.....	269
V.2. Экспериментальные исследования процессов взаимодействия металла с водородом. Фазовые превращения в титане и цирконии	271
16.1. Взаимодействие циркония с водородом. Фазовые превращения	271
Общие сведения.....	271

Аттестация образцов и условия проведения экспериментов	274
Вклад поверхностных и диффузионных процессов в кинетику процесса взаимодействия водорода с цирконием	279
Взаимодействие циркония с атомарным водородом	284
Твердофазные превращения в цирконии, инициируемые увеличением концентрации водорода в объеме образца	292
Влияние поверхностных пленок на взаимодействие циркония с водородом	303
Зависимость скорости фазовых превращений от содержания примесей в объеме образца	319
16.2. Экспериментальное изучение фазовых превращений в гидриде титана.....	326
Гидриды титана	326
Условия эксперимента	330
Фазовые превращения в титане, инициируемые увеличением концентрации водорода в объеме	330
Литература к главе V.2.	337

ГЛАВА VI. Исследования сплавов внедрения на основе

фуллеритов. Особенности фазовых превращений.....	345
17. Водород в фуллеритах.....	346
17.1. Особенности образования гидрофуллеритов	346
а) Решеточный водород.....	347
б) Фуллерированный водород	348
17.2. Экспериментальные исследования водородсорбционных свойств фуллеритов	350
Методы синтеза гидрофуллеритов	350
Гидрирование механических смесей	352
Взаимодействие водорода с металлофуллеритами.....	353
Гидрирование фуллеритов атомизированным водородом	353
Жидкофазное гидрирование	356
Другие особенности взаимодействия фуллеритов с водородом (дейтерием).....	358
17.3. Структурные превращения при гидрировании фуллерита. Растворимость водорода в решетке фуллерита...	364
Свободная энергия ПК и ОЦК фаз	365
Температура фазового перехода ПКР→ОЦКР.	
Диаграмма состояния системы	371

Растворимость водорода в ОЦК фазе	373
18. Фуллериды металлов.....	376
18.1. Исследование фазового перехода ГЦК→ОЦК в фуллеридах металлов	377
Свободная энергия ГЦК фазы. Уравнения термодинамического равновесия	378
Свободная энергия ОЦК фазы. Уравнения термодинамического равновесия	383
Обсуждение результатов расчетов	385
18.2. Сверхпроводящий порядок в фуллеридах щелочных металлов.....	392
Свободная энергия кристалла	393
Расчет уравнений равновесия	400
Оценка температуры спинового упорядочения	401
Литература к главе VI	407