

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕЦЕНЗЕНТОВ.....	9
ОТ АВТОРОВ	11
ПРЕДИСЛОВИЕ	13
ГЛАВА I. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД АТОМНЫЙ ПОРЯДОК-ПОРЯДОК	
$L1_1 \rightleftharpoons L1_0$ (ГЦР $\rightleftharpoons$ ГЦТ) ТИПА CuPt $\rightleftharpoons$ CuAu	15
Свободные энергии фаз	15
ГЦР фаза	17
ГЦТ фаза	18
Уравнения равновесия. Температура фазового перехода	20
Обсуждение результатов расчетов. Диаграмма состояния	21
Литература к главе I	27
ГЛАВА II. ПОЭТАПНОЕ АТОМНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ	
$A1 \rightarrow L1_2 \rightarrow L1_2^*$ В СПЛАВАХ FePd _{3-x} Au _x	29
Свободная энергия. Уравнение равновесия фазы $L1_2$, температура перехода $A1 \rightarrow L1_2$ сплава AB _{3-x} C _x	31
Свободная энергия. Уравнение равновесия фазы $L1_2^*$, температура перехода $L1_2 \rightarrow L1_2^*$ сплава AB _{3-x} C _x	34
Анализ полученных результатов. Сравнение с экспериментом..	36
Свободные энергии фаз $A1$, $L1_2$, $L1_2^*$	37
Параметры порядка фаз $L1_2$, $L1_2^*$	43
Температуры упорядочения фаз $L1_2$, $L1_2^*$. Диаграмма состояния	45
Литература к главе II	49
ГЛАВА III. СВЕРХСТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ $G5 \rightleftharpoons DO_{19}$ (ГЦК $\rightleftharpoons$ ГПУ), СТИМУЛИРОВАННЫЕ ПРИМЕСЬЮ ВНЕДРЕНИЯ	51
Свободные энергии сплава A ₃ BD _x с ГЦК и ГПУ решетками ...	51
Атомный порядок и равновесная концентрация примеси D	55
Фазовый переход $G5 \rightleftharpoons DO_{19}$ (ГЦК $\rightleftharpoons$ ГПУ)	57
Диаграмма состояния	60
Литература к главе III	64
ГЛАВА IV. АТОМНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В СПЛАВАХ A ₃ BC _x СТРУКТУРЫ A15 ТИПА Cr ₃ Si	65
Постановка задачи	66
Конфигурационная энергия. Свободная энергия. Атомный порядок	69
Растворимость примеси C по методу средних энергий	74
Растворимость примеси C по методу конфигураций	75

Концентрационная зависимость растворимости примеси в неупорядоченном сплаве	77
Температурная зависимость растворимости примеси в неупорядоченном сплаве	81
Влияние атомного порядка на растворимость примеси ...	82
Литература к главе IV	87
ГЛАВА V. СВЕРХСТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ $B8_1 \rightleftharpoons C6$	
ТИПА $NiAs \rightleftharpoons CdI_2$ В СПЛАВАХ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРНЫХ ВАКАНСИЙ	89
Расчет свободных энергий фаз	90
Фаза типа $NiAs$	92
Фаза типа CdI_2	93
Оценка температуры и концентрационной области гомогенности сверхструктурных превращений	94
Сопоставление расчетов с экспериментальными данными соединений $CoSe_{1+x}$, $CoTe_{1+x}$, $NiSe_{1+x}$	100
Литература к главе V	102
ГЛАВА VI. ФАЗОВОЕ РАССЛОЕНИЕ $DO_3 \rightarrow G5 \rightarrow B4 + D1 + A1$	
УПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ ЖЕЛЕЗО- АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ПРИ АЗОТИРОВАНИИ..	
Структуры фаз. Параметры порядка. Энергии взаимодействия атомов	106
Свободные энергии фаз. Уравнения равновесия	108
Фаза Fe_3AlN	109
Фаза AlN	110
Фаза Fe_4N	111
Фаза Fe_4	111
Анализ результатов расчетов	113
Литература к главе VI	117
ГЛАВА VII. ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ	
Алмаз. Расчет свободной энергии	122
Графит. Свободная энергия	125
Карбин. Расчет свободной энергии.....	128
Свободная энергия карбина K_1	132
Свободная энергия карбина K_2	133
Свободная энергия карбина K_3	135
Фуллерит. Свободная энергия фуллерита	136
Обсуждение результатов теории. Сравнение с экспериментом.	
Температура и давление упорядочения. Диаграмма состояния.	139
Литература к главе VII.....	150

ГЛАВА VIII. СТРУКТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ГЦК-ОЦК В ФУЛЛЕРИДАХ МЕТАЛЛОВ	157
Свободная энергия ГЦК фазы. Уравнения термодинамического равновесия	158
Свободная энергия ОЦК фазы. Уравнения термодинамического равновесия	162
Обсуждение результатов расчетов	164
Литература к главе VIII	171
ГЛАВА IX. СТРУКТУРНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ ПКР-ОЦКР ПРИ ГИДРИРОВАНИИ ФУЛЛЕРИТА	173
Свободные энергии ПК и ОЦК фаз	174
Температура фазового перехода ПКР-ОЦКР. Диаграмма состояния системы	180
Растворимость водорода в ОЦК фазе	183
Литература к главе IX	187
ГЛАВА X. СТРУКТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД $V1 \rightarrow L1_2$ (ПК $\rightarrow$ ГЦК) В СМЕШАННОМ ТВЕРДОФАЗНОМ ФУЛЛЕРИТЕ $C_{60}-C_{70}$	193
Свободные энергии фаз	196
Свободная энергия ПК фазы	197
Свободная энергия ГЦК фазы типа $L1_2$	199
Свободная энергия ГЦК фазы типа $L1_0$	200
Обсуждение результатов расчетов. Построение диаграммы состояния фуллерита	201
Конфигурационная теплоемкость фуллерита в области фазового перехода ПКР-ГЦКР	207
Интерпретация результатов расчетов теплоемкости	209
Литература к главе X	215
ГЛАВА XI. СВЕРХПРОВОДЯЩЕЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ФУЛЛЕРИДАХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ	219
Определение свободной энергии	221
Уравнения термодинамического равновесия	226
Температура спинового упорядочения	227
Сравнение с экспериментом. Оценка энергетических параметров	229
Литература к главе XI	233
ГЛАВА XII. ЗАРЯДОВОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В КРИСТАЛЛАХ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ $C6$	235
Постановка задачи	236
Параметр порядка. Вероятности замещения узлов атомами. Числа атомных пар	239
Конфигурационная энергия	241
Критерий энергетической выгодности зарядово- упорядоченного состояния	244

Термодинамическая вероятность. Свободная энергия	245
Равновесный параметр зарядового порядка	246
Температура Вервея. Влияние примеси на температуру упорядочения	248
Характер распределения атомов примеси и его влияние на температуру упорядочения	251
Сравнение теории с экспериментом. Оценка параметров теории	254
Литература к главе XII	260
ГЛАВА XIII. ФЕРРОМАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В РАСПАДАЮЩИХСЯ СПЛАВАХ С ГПУ РЕШЕТКОЙ.....	263
Структурная и магнитная свободные энергии сплава	263
Уравнения термодинамического равновесия. Температура распада. Температура Кюри	266
Обсуждение результатов расчетов. Сравнение с экспериментом	268
Литература к главе XIII	275
ГЛАВА XIV. ФЕРРО- И АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ В РАСПАДАЮЩИХСЯ СПЛАВАХ ГПУ СТРУКТУР...	277
Параметры распада и намагниченности	278
Свободная энергия	280
Уравнения равновесия	282
Обсуждение уравнений равновесия	286
Сравнение с экспериментом	289
Литература к главе XIV.....	292
ГЛАВА XV. ФЕРРО- И АНТИФЕРРОМАГНЕТИЗМ АТОМНОУПОРЯДОЧИВАЮЩИХСЯ СПЛАВОВ СО СТРУКТУРАМИ B8₁ и B19	293
Структуры сплавов. Параметры атомного и магнитного порядков	295
Свободная энергия сплава структуры B8 ₁	297
Уравнения равновесия	300
Температуры Курнакова, Кюри, Нееля	301
Частные случаи ферро- и антиферромагнетизма. Взаимное влияние атомного упорядочения и магнетизма	303
Исследование фазы B19. Диаграммы состояния	304
Литература к главе XV	310
ГЛАВА XVI. ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ И АТОМНОГО ПОРЯДКА НА НАМАГНИЧЕНИЕ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ СТРУКТУРЫ D8₅.....	313
Теория	315
Обсуждение результатов теории. Сопоставление с экспериментальными данными	321

Бинарный сплав A_7B_6	321
Тройной сплав $A_7B_{6-x}C_x$	325
Литература к главе XVI	330
ГЛАВА XVII. МАГНЕТИЗМ И БЛИЖНЕЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В АМОРФНОМ КОНДЕНСАТЕ ИЗ ПОЛЫХ И ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ	333
Теория	334
Интерпретация результатов расчетов	340
Литература к главе XVII	348
ГЛАВА XVIII. ДИПОЛЬНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В КРИСТАЛЛАХ СТРУКТУРЫ G5 ТИПА ПЕРОВСКИТА	351
Свободная энергия кристалла. Энергия упорядочения	354
Параметр дипольного порядка. Температура Кюри	363
Конфигурационная теплоемкость	365
Литература к главе XVIII	372
ГЛАВА XIX. ФЕРРО- И АНТИФЕРРОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПОРЯДКИ В КРИСТАЛЛАХ СТРУКТУРЫ DO_9	375
Теория	376
Иллюстрация результатов теории для кристалла WO_3	383
Литература к главе XIX	388
ГЛАВА XX. ФАЗОВОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ ПАРАЭЛЕКТРИК- ФЕРРОЭЛЕКТРИК В KDP КРИСТАЛЛАХ (СТРУКТУРЫ H_{22})	391
Структура KDP кристаллов. Параметры порядка	395
Свободная и внутренняя конфигурационная энергия. Уравнения термодинамического равновесия. Температура Кюри	399
Конфигурационная теплоемкость	405
Термодинамический потенциал. Зависимость параметра порядка от напряженности электрического поля	406
Диэлектрическая восприимчивость	408
Литература к главе XX	412
ГЛАВА XXI. ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПАРАЭЛЕКТРИК- АНТИФЕРРОЭЛЕКТРИК В ADR КРИСТАЛЛАХ ...	415
Структура кристалла в пара- и феррофазе. Параметры поляризационного порядка	417
Свободная энергия. Уравнения равновесия. Параметр антиполяризационного порядка	420
Конфигурационная теплоемкость	426
Термодинамический потенциал системы. Параметр дипольного порядка, как функция напряженности электрического поля. Диэлектрический гистерезис	429
Диэлектрическая восприимчивость	431
Литература к главе XXI	435

ГЛАВА XXII. ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ НА ФАЗОВОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ В ADR КРИСТАЛЛАХ	437
Структура и параметры дипольного порядка. Вероятности смещений структурных комплексов	439
Внутренняя конфигурационная энергия	441
Термодинамическая вероятность состояния	445
Свободная энергия. Уравнения равновесия. Температура Кюри. Диаграмма состояния	446
Литература к главе XXII	454
ГЛАВА XXIII. ДИПОЛЬНОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В СМЕШАННЫХ KDP И ADR КРИСТАЛЛАХ ДИГИДРОФОСФАТА КАЛИЯ-АММОНИЯ	457
Структура кристалла. Параметры порядка	458
Внутренняя конфигурационная энергия	462
Термодинамическая вероятность состояния. Свободная энергия. Уравнения равновесия. Диаграмма состояния	466
Термодинамический потенциал. Модуль сдвига. Диэлектрическая восприимчивость	470
Литература к главе XXIII	475
ГЛАВА XXIV. ДЕФОРМАЦИОННОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ В КРИСТАЛЛАХ СТРУКТУРЫ H ₄ ТИПА ШЕЕЛИТА	477
Структура кристалла в пара- и феррофазе. Параметры деформационного порядка	480
Свободная энергия. Уравнения равновесия	483
Термодинамический потенциал. Деформационный гистерезис	488
Литература к главе XXIV	495
ГЛАВА XXV. ДЕФОРМАЦИОННЫЙ ПОРЯДОК И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ СО СТРУКТУРОЙ G5 ₁	499
Параметры порядка. Числа атомных пар. Энергии взаимодействия атомов	500
Внутренняя конфигурационная энергия феррофазы. Термодинамическая вероятность состояния	504
Свободная энергия. Уравнения равновесия. Температура Кюри-Вейсса	505
Термодинамический потенциал. Исследование деформационного параметра порядка	507
Деформационный гистерезис	512
Конфигурационная теплоемкость	514
Упругая податливость и модуль продольной упругости	516
Литература к главе XXV	520