**Хван, Александра Вячеславовна.**

## Физико-химические основы разработки марганцовистых сталей : Экспериментальные исследования и термодинамическое моделирование : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.04 / Хван Александра Вячеславовна; [Место защиты: ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»]. - Москва, 2020. - 513 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор наук Хван Александра Вячеславовна

1 ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

2 Обзор литературы

2.1 Использование термодинамического моделирования в разработке высокомарганцовистых сталей

2.2 Термодинамические свойства и фазовые равновесия в системах, образованных легирующими элементами высокомарганцовистых сталей

2.2.1 Система Ее-Мп-КЬ-С-КК- (V)

2.2.1.1 Двухкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Мп-КЬ-С-К-^)

2.2.1.2 Трехкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Мп-КЬ-С-К-^)

2.2.1.3 Четырехкомпонентные системы Ее-Мп-КЬ-С и Ее-Мп-КЬ-К

2.2.2 Система Ее-Сг-КЬ-С

2.2.2.1 Двухкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Сг-КЬ-С

2.2.2.2 Трехкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Сг-КЬ-С

2.2.3 Система Ее-Мп-А1-С

2.2.3.1 Двухкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Мп-А1-С

2.2.3.2 Трехкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Мп-А1-С

2.2.3.3 Данные по 4-х компонентной системе Ее-Мп-А1-С

2.2.4 Система Ее-Мп-Се-С

2.2.4.1 Двухкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Мп-Се-С

2.2.4.2 Трехкомпонентные системы, входящие в систему Ее-Мп-Се-С

2.3 Выводы по результатам анализа литературных данных о термодинамических 71 свойствах фаз и фазовых равновесиях в системах, образованных легирующими элементами высокомарганцовистых сталей

3 Методика исследования

3.1 Методика экспериментальных исследований

3.1.1 Подготовка образцов

3.1.2 Микроструктурные исследования

3.1.3 Рентгеновский фазовый анализ

3.1.4 Калориметрические исследования

3.1.4.1 Определение энтальпии образования веществ

3.1.4.2 Дифференциальный термический анализ образцов исследуемых систем

3.2 Методики теоретических исследований

3.2.1 Квантовомеханические расчеты ab initio

3.2.2 Термодинамические модели, используемые для описания твердых растворов, интерметаллидов, карбидов и жидкой фазы

4 Результаты исследования системы Fe-Mn-Nb-C-N-(V)

4.1 Исследование термодинамических свойств интерметаллических соединений в системе Fe-Mn-Nb-C-N-(V)

4.1.1 Результаты калориметрических исследований Лавес фазы С14 Fe2Nb

4.1.2 Расчеты из первых принципов энергии образования гипотетических карбидов ниобия

4.1.3 Результаты расчетов из первых принципов для соединений, образующихся в системе Fe-Nb-V

4.2 Результаты термодинамического моделирования системы Fe-Mn-Nb-C-N-(V)

4.2.1 Термодинамическое моделирование 2-х компонентных систем, входящих в систему

Fe-Mn-Nb-C-N-(V)

4.2.1.1. Термодинамическое моделирование системы Fe-Nb

4.2.1.2 Термодинамическое моделирование системы Nb-N

4.2.2 Термодинамическое моделирование 3-х компонентных систем, входящих в систему Fe-Mn-Nb-C-N- (V)

4.2.2.1 Термодинамическое моделирование системы Fe-Mn-Nb

4.2.2.2 Термодинамическое моделирование системы Fe-Nb-C

4.2.2.3 Термодинамическое моделирование системы Mn-Nb-C

4.2.2.4 Термодинамическое моделирование системы Fe-Nb-N

4.2.2.5 Термодинамическое моделирование системы Mn-Nb-N

4.2.2.6 Термодинамическое моделирование системы Nb-C-N

4.2.2.7 Термодинамическое моделирование системы Fe-Nb-V

4.2.3 Термодинамическое моделирование 4-х компонентных систем, входящих в систему Fe-Mn-Nb-C-N-(V)

4.2.3.1 Термодинамическое моделирование системы Fe-Mn-Nb-C

4.2.3.2 Термодинамическое моделирование системы Fe-Mn-Nb-N

4.3 Выводы к 4-ой главе

5 Результаты исследования системы Fe-Cr-Nb-C

5.1 Исследование термодинамических свойств интерметаллических соединений в

системе Fe-Cr-Nb-C

5.1.1 Калориметрические исследования фаз Лавеса в системе Fe-Cr-Nb

5.1.2 Расчеты из первых принципов энергии образования интерметаллических

соединений в системе Ее-Сг-КЬ

5.2 Экспериментальное исследование системы Ее-Сг-КЬ

5.3 Термодинамическое моделирование 2-х компонентных систем, входящих в систему Ее-Сг-КЬ-С

5.3.1 Термодинамическое моделирование системы Сг-С

5.3.2 Термодинамическое моделирование системы Сг-КЬ

5.4 Термодинамическое моделирование 3 -х компонентных систем, входящих в систему Ее-Сг-КЬ-С

5.4.1 Термодинамическое моделирование системы Сг-КЬ-С

5.4.2 Термодинамическое моделирование системы Ее-Сг-С

5.4.3 Термодинамическое моделирование системы Ее-Сг-КЬ

5.5 Термодинамическое моделирование системы Ее-Сг-КЬ-С

5.6 Выводы к 5-ой главе

6 Результаты исследования системы Ее-Мп-А1-С

6.1 Экспериментальное исследование фазовых равновесий системы Мп-А1-С

6.2 Экспериментальное исследование фазовых равновесий системы Ее-Мп-А1-С

6.3 Расчеты из первых принципов стабильности к-карбида

6.4 Термодинамическое моделирование системы Мп-А1-С

6.5 Выводы к 6-ой главе

7 Построение многокомпонентной базы данных

7.1 Выводы к 7-ой главе

8 Результаты исследования системы Ее-Мп-Се-С

8.1 Результаты экспериментальных исследований фазовых превращений в системе Ее-Се-Мп

8.2 Результаты экспериментального исследования энтальпий образования интерметаллических фаз в системе Ее-Се-Мп

8.3 Результаты экспериментальных исследований фазовых превращений в системе Ее-Се-С

8.4 Выводы к 8-ой главе

9 ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

10 ВЫВОДЫ