**Чаплыгин, Павел Александрович.**

**Структурно-фазовые характеристики интерметаллида NiAl вблизи эквиатомного состава : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.07 / Чаплыгин Павел Александрович; [Место защиты: Алт. гос. техн. ун-т им. И.И. Ползунова]. - Барнаул, 2018. - 103 с. : ил.**

**Оглавление диссертациикандидат наук Чаплыгин Павел Александрович**

**ОГЛАВЛЕНИЕ**

**ГЛАВА 1 СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ**

**1.1 Упорядоченные фазы (сверхструктуры) в двухкомпонентных системах на основе ОЦК решетки**

**1.2 Диаграмма состояния М-М и её особенности**

**1.3 Компьютерное моделирование в физике конденсированного состояния**

**1.4 Компьютерное моделирование структурно-фазовых превращений в сплавах**

**1.5 Постановка задачи исследования 18 ГЛАВА 2 МЕТОДЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

**2.1 Методы компьютерного моделирования на микроуровне**

**2.2 Описание методов компьютерного моделирования**

**2.2 Исследуемые параметры и визуализаторы**

**ГЛАВА 3 СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ**

**ИНТЕРМЕТАЛЛИДА МА1**

**3.1 Структурно-энергетические характеристики интерметаллида МА1 в процессе термоциклирования**

**3.2 Особенности формирования антифазных доменов в процессе ступенчатого охлаждения**

**3.3 Влияние концентрации вакансий на структурно-энергетические характеристики интерметаллида NiAl**

**3.4 Структурно-энергетические характеристики сплавов МА1, имеющих отклонения от стехиометрического состава**

**3.5 Влияние деформации на структурно-энергетические характеристики интерметаллида NiAl**

**3.6 Влияние размера расчетного блока на процесс термоциклирования 58 ГЛАВА 4 ВЛИЯНИЕ ПЛАНАРНЫХ ДЕФЕКТОВ НА СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА МА1**

**4.1 Влияние комплексов АФГ на структурно-энергетические характеристики интерметаллида NiAl**

**4.2 Расчет энергии образования АФГ**

**4.3 Влияние расстояния между АФГ на структурно-энергетические характеристики интерметаллида NiAl 76 ЗАКЛЮЧЕНИЕ 87 СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ**