

Структурно-фазовые изменения при фазовом переходе $D1_a \rightarrow A1$ в сплаве Ni_4Mo *

А.А. Клопотов¹, Ю.А. Абзаев¹, Л.И. Тришкина¹, Т.В. Черкасова¹,
А.И. Потехаев²

¹Томский государственный архитектурно-строительный университет
(Томск, Россия)

²Национальный исследовательский Томский государственный университет
(Томск, Россия)

Structural-Phase Changes During the $D1_a \rightarrow A1$ Phase Transition in the Ni_4Mo Alloy

A.A. Klopotov¹, Yu.A. Abzaev¹, L.I. Trishkina¹, T.V. Cherkasova¹, A.I. Potekhaev²

¹Tomsk State University of Architecture and Building (Tomsk, Russia)

²National Research Tomsk State University (Tomsk, Russia)

Представлены результаты исследования структурных и тепловых эффектов в области фазового перехода порядок-беспорядок $D1_a \rightarrow A1$ в сплаве Ni_4Mo . Установлено, что переход $D1_a \rightarrow A1$ происходит в узком температурном интервале 16 °С и параметр дальнего порядка η в этой области уменьшается от 1 до 0.85 и при достижении T_K уменьшается скачком до 0. Исследованием тепловых эффектов получена температурная зависимость теплоемкости $C_p(T)$ и определены энтальпия и энтропия фазового перехода порядок-беспорядок $D1_a \rightarrow A1$ в сплаве Ni_4Mo . Установлено, что основной вклад в энтропию превращения конфигурационный. Неконфигурационный вклад небольшой и способствует процессам упорядочения. Установлено, что начало отклонения на температурной зависимости $C_p(T)$ от линейной коррелирует с началом образования двухфазного состояния $D1_a + A1$ и началом уменьшения атомного дальнего порядка в сверхструктуре $D1_a$. На основе расчетов из первых принципов термодинамических параметров соединений получены энтальпии образований в системе Ni-Mo и установлено, что наиболее стабильным в этой системе является соединение Ni_3Mo . Теоретические расчеты энтальпии образования соединения дают значение -8.3 кДж/моль.

Ключевые слова: сплав Ni_4Mo , сверхструктура $D1_a$, фазовый переход порядок-беспорядок, теплоемкость.

The results of studying the structural and thermal effects in the region of the $D1_a \rightarrow A1$ order-disorder phase transition in the Ni_4Mo alloy are presented. It is found that the $D1_a \rightarrow A1$ transition occurs in a narrow temperature range of 16 °C while the long-range order parameter η in this range decreases from 1 to 0.85 and, upon reaching T_K , decreases abruptly to 0. Studying the thermal effects allows obtaining the temperature dependence of the specific heat $C_p(T)$ is obtained and determination of the enthalpy and entropy of the $D1_a \rightarrow A1$ order-disorder phase transition in the Ni_4Mo alloy. It is found that the main contribution to the entropy of transformation is configurational. The non-configuration contribution is not large and contributes to the ordering processes. It is established that the beginning of the deviation on the temperature dependence of $C_p(T)$ from the linear one correlates with the beginning of the formation of the two-phase state $D1_a + A1$ and the beginning of a decrease in the atomic long-range order in the $D1_a$. Based on calculations based on the first principles of thermodynamic parameters of compounds, the enthalpy of formation in the Ni-Mo system is obtained. It is found that the most stable compound in this system is Ni_3Mo . Theoretical calculations of the compound formation enthalpy give a value of -8.3 kJ/mol.

Keywords: alloys Ni_4Mo , superstructure $D1_a$, order-disorder phase transition, heat capacity.

DOI: 10.14258/izvasu(2022)1-05

*Работа выполнена при поддержке госзадания Министерства науки и высшего образования РФ FEMN-2020-0004.

Введение

Суперсплавы на основе Ni активно используются как жаропрочные сплавы в двигателях самолетов [1]. Существующие в настоящее время тенденции к повышению более эффективной работы турбинных двигателей требуют создания более высокотемпературных суперсплавов на основе Ni. Одним из базовых легирующих элементов в суперсплавах на основе Ni является Mo. Также следует отметить, что сплавы из системы Ni-Mo благодаря их уникальным физико-механическим свойствам являются основой (резистивных прецизионных сплавов, коррозионных сплавов, сплавов для оксидных катодов [2, 3]).

Для дальнейшей работы по созданию новых суперсплавов на основе Ni необходимы фундаментальные исследования об особенностях структурно-фазовых изменений в области фазовых переходов в сплавах на основе Ni-Mo. Без знания термодинамических характеристик не может быть достигнуто глубокого понимания любого превращения, в том числе и превращения порядок — беспорядок (П-Б).

В области фазовых переходов (ФП) порядок — беспорядок [1, 2] происходят структурно-фазовые изменения, которые оказывают значительное влияние на физико-механические свойства в упорядочивающихся сплавах. В классе этих материалов уникальными физико-механическими свойствами обладают упорядочивающиеся сплавы на основе Ni₄Mo со сверхструктурой D1_a. Отчасти эти свойства обусловлены своеобразной сложной тетрагональной решеткой на основе искаженной гранцентрированной, что характеризует сверхструктуру D1_a упорядоченного сплава Ni₄Mo (рис. 1).

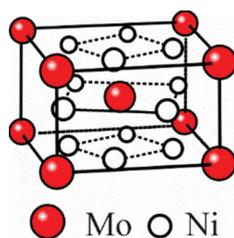


Рис. 1. Элементарная ячейка сверхструктуры D1_a

Трудности исследования ФП порядок — беспорядок в сплавах на основе Ni₄Mo связаны как с высокими температурами плавления T_{пл} этих сплавов, так и достаточно высокими температурами T_к. Поэтому, несмотря на достаточно большое количество работ, посвященных исследованию ФП в сплавах на основе Ni₄Mo [3–10], необходимы дальнейшие исследования.

В бинарной фазовой диаграмме Ni-Mo установлено существование трех стабильных соединений: Ni₈Mo (прототип Pt₈Ti, пространственная группа 4/m2/m2/m), Ni₄Mo (D1_a), Ni₃Mo (D0_a) и δ-NiMo (пространственная группа P2₁2₁2₁) [11].

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований тепловых эффектов и изменения структурно-фазовых состояний в области фазового перехода порядок — беспорядок в сплаве Ni₄Mo со сверхструктурой D1_a. Также в работе представлены теоретические результаты расчетов из первых принципов стабильности, механических, термодинамических характеристик сплава Ni₄Mo.

Методика эксперимента

Для выплавки сплава Ni₄Mo были использованы металлы Ni и Mo чистотой 99,96%. При помощи индукционной плавки в среде аргона были получены слитки с двойным переплавом. Полученные слитки прокованы в полосы при температуре 115 °С. Затем приготовленные полосы из сплава Ni₄Mo изотермически отжигали в течение 100 часов при температуре 1200 °С. После отжига был проведен химический анализ полос и установлен следующий состав Ni_{79,3}Mo_{20,7}.

Разупорядоченное состояние сплава Ni₄Mo достигалось закалкой от температуры 1050 °С в ледяную воду. Упорядоченное состояние сплава Ni₄Mo достигали при помощи ступенчатых отжигов охлаждением со скоростью 5 °/сутки от T < T_к (T_к = 880 °С) до температуры 400 °С. Температурная зависимость параметра дальнего порядка η(T) получена в результате закалки образцов от 400 °С до температуры T_к.

Дифрактограммы получены при комнатной температуре на дифрактометре ДРОН-1,5 в Cu_{Kα}-излучении.

Методика расчета параметра дальнего порядка (ДП) η и структурного фактора для сверхструктуры D1_a подробно описаны в [4]. В основе расчета лежит соотношение интегральных интенсивностей сверхструктурных и основных рефлексов от полученных дифрактограмм с учетом необходимых поправок [12].

Температурная зависимость теплоемкости C_p(T) сплава Ni₄Mo измерялась до 700 °С методом тройного теплового моста (ТТМ) [13] на специально сконструированной установке. В температурном интервале выше 700 °С измерение теплоемкости C_p проводили методом Смита [14, 15] на дополнительной оригинальной приставке к установке ТТМ. При этом электрическая схема измерения дифференциальной термо-ЭДС и система линейного нагрева были идентичны. Расчет температурных зависимостей C_p(T) в методах ТТМ и Смита проводили по дифференциальным кривым нагрева эталонного и исследуемого образцов, записанным на потенциометре. Эталонном сравнения для метода ТТМ использовали образцы из чистой меди, в методе Смита — сталь марки 0X18H9T.

В работе проведены расчеты из первых принципов стабильности, механических, термодинамических характеристик сплава Ni₄Mo. Эталонная решетка с полной структурной информацией была найдена в кристаллографической базе COD [15]. Структурные параметры соединения Ni₄Mo, объем

элементарной ячейки, пространственную группу, энергию решетки рассчитывали в коде CASTEP [16] при 0 К. Термодинамические характеристики соединений в системе Ni-Mo были реализованы с помощью ресурсов [17]. Расчеты из первых принципов проводились в VASP при 0 К и давлении 0 Па в рамках функционала электронной плотности (DFT). В расчетах использовались градиентные потенциалы атомов (GGA) с радиусом обрезания 520 эВ. Учитывалась спиновая поляризация. Использовался метод Монкхорста-Пака для выбора точек в обратном пространстве с центром в точке G.

Результаты исследования и их обсуждение

Рентгеноструктурные исследования

Рентгеноструктурные исследования образцов сплава Ni₄Mo, закаленного от температуры 1050 °С, по-

зволило установить, что сплав находится в разупорядоченном состоянии с ГЦК структурой. В результате изотермических ступенчатых отжигов в сплаве Ni₄Mo получено упорядоченное состояние со сверхструктурой D1_a, которое хорошо зафиксировано на дифрактограммах (рис. 2). Упорядоченное расположение атомов по узлам кристаллической решетки со сверхструктурой D1_a привело к появлению дополнительных сверхструктурных рефлексов (рефлексы с дробными индексами hkl на дифрактограмме, рис. 2). Кроме того, упорядочение кристаллической решетки способствует тетрагональному искажению неупорядоченной ГЦК решетки. В результате на дифрактограмме наблюдается расщепление основных рефлексов, кроме рефлексов (111) и (222).

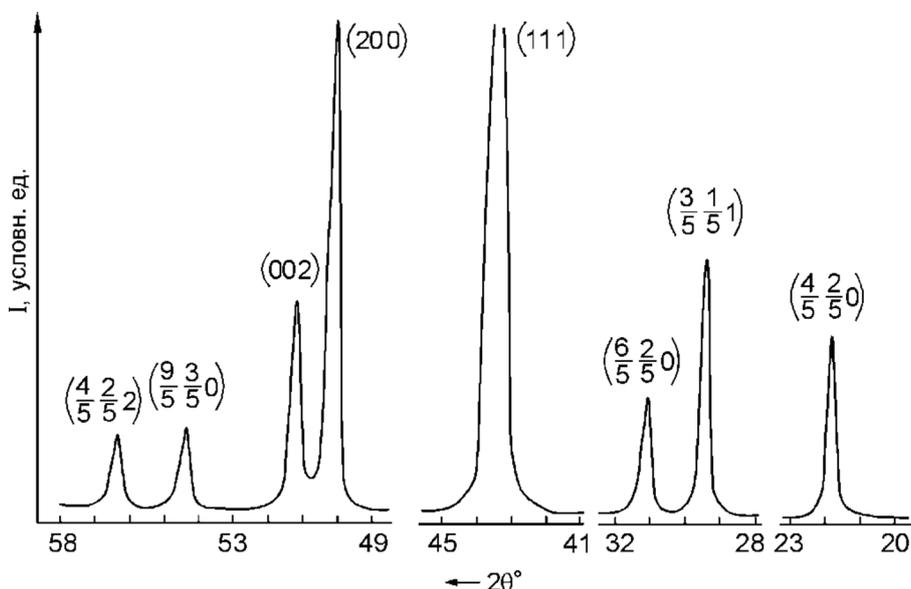


Рис. 2. Фрагменты дифрактограмм сплава Ni₄Mo в упорядоченном состоянии со сверхструктурой D1_a

В таблице 1 приведены параметры элементарных ячеек в сплаве Ni₄Mo в разных структурных состояниях. Упорядочивающие отжиги приводят к образованию сверхструктуры D1_a (рис. 1). На рентгенограммах сплавов Ni₄Mo со сверхструктурой D1_a обнаружены

сверхструктурные рефлексы. Кроме того, упорядоченное расположение атомов вызывает тетрагональное искажение исходной ГЦК решетки, которое сопровождается расщеплением всех основных линий, кроме (111) и (222).

Таблица 1

Структурные параметры в сплаве Ni₄Mo в разных структурных состояниях

Структура A1		Структура D1 _a	Источник
Параметры элементарной ячейки, нм		Степень ДП η	
a=0.36082	a=0.5728 c=0.3572	1.0	Настоящая работа
a=0.3612		-	[10]
	a=0.5727 c=0.3566	-	[10]
	a=0.5720 c=0.3564	-	Из базы COD [15]

В результате проведенных экспериментов и расчетов получены температурные зависимости параметра ДП η в сверхструктуре $D1_a$ и объемной доли фазы A1 от температуры закалки в сплаве Ni_4Mo (рис. 3). При помощи ступенчатых изотермических отжигов удалось получить в сплаве Ni_4Mo однофазное состояние со сверхструктурой $D1_a$ и параметром ДП сплава $\eta = 1.0$. При нагреве сплава от низких температур (от 400 °C до 700 °C) структурно-фазовое состояние не изменяется и параметр дальнего порядка $\eta = 1.0$. При достижении температуры $T = 860$ °C на дифрактограммах наблюдается появление дополнительных рефлексов от разупорядоченной фазы A1, и мы отмечаем двухфазное состояние ($D1_a + A1$) (рис. 3в). Кроме того, существование двухфазного состояния ($D1_a + A1$) проявляется в уширении тетрагональных дублетов фазы $D1_a$. Это уширение основ-

ных структурных рефлексов происходит за счет наложения основных рефлексов разупорядоченной фазы A1 с основными рефлексами $D1_a$ фазы. Для определения дальнего порядка только в упорядоченной фазе $D1_a$ было проведено разделение мультиплетов структурных линий на дифрактограмме по методу, представленному в [18]. Установлено, что температурная двухфазная область $D1_a + A1$ узкая (16 ± 3 °C) (рис. 3). Полученная в настоящей работе температура перехода П-Б (T_K) с хорошо согласуется с данными работы [19]. В области T_K параметр ДП уменьшается до значения $\eta = 0.85 \pm 0.03$, после которого скачком уменьшается до нуля. Скачкообразное уменьшение параметра порядка η в упорядоченной фазе $D1_a$ в области T_K при структурно-фазовом переходе $D1_a \rightarrow A1$ и наличие двухфазности однозначно свидетельствуют о том, что это переход ФП I рода.

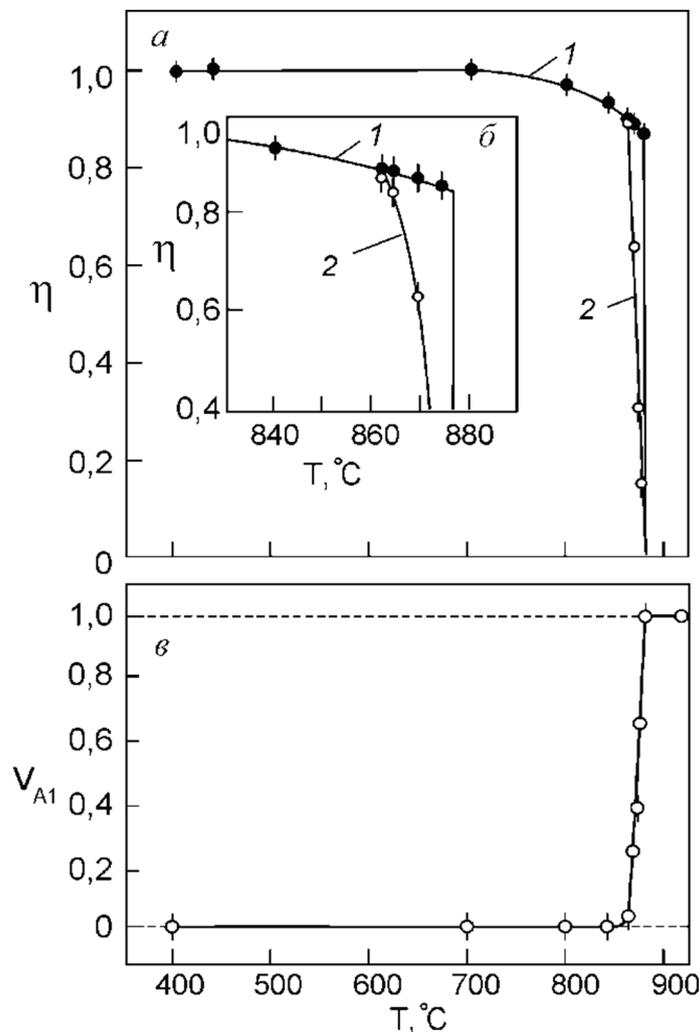


Рис. 3. Зависимости параметра дальнего порядка η от температуры закалки в сплаве Ni_4Mo (1 — параметр η в упорядоченной фазе $D1_a$; 2 — параметр η усредненный по всему образцу с учетом разупорядоченной фазы A1) (a).

На вставке (б) зависимость $\eta = \eta(T)$ в увеличенном масштабе в области T_K , предшествующей ФП $D1_a \rightarrow A1$.

На рис. в приведена объемная доля фазы A1 от температуры закалки

Особенности температурной зависимости параметра дальнего порядка $\eta = \eta(T)$ позволили сделать предположение о существовании в области ФП $D1_a \rightarrow A1$ слабоустойчивых структурных состояний, которые трудно зафиксировать при помощи закалки образцов из высокотемпературных областей.

Теплоемкость и энергия превращения сплавов Ni₄Mo при фазовом переходе порядок — беспорядок

Измеренная методом тройного теплового моста температурная зависимость теплоемкости $C_p(T)$ спла-

ва Ni₄Mo приведена на рисунке 4 (кривая 1). Видно, что в температурной области вдали от ФП $D1_a \rightarrow A1$ зависимость $C_p(T)$ подчиняется линейному закону. Поглощение тепла на температурной зависимости $C_p(T)$ свидетельствует о ФП $D1_a \rightarrow A1$ и проявляется в виде максимума в температурной области 830–880 °С. Изменение на температурной зависимости $C_p(T)$ вблизи T_k характерно для размытого фазового перехода [20].

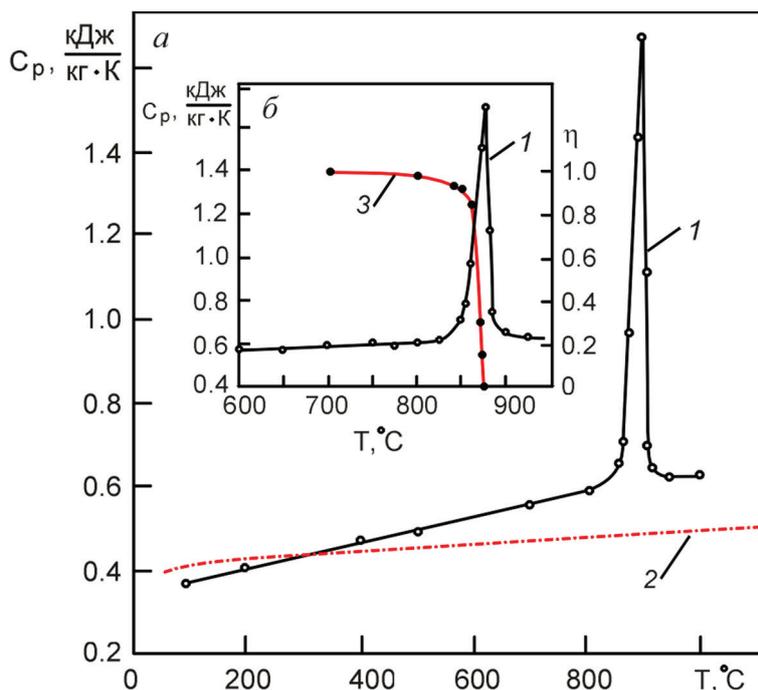


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости сплава Ni₄Mo (кривая 1); кривая 2 — теплоемкость Ni₄Mo, вычисленная по правилу Коппа-Неймана (а). На вставке (б) участок зависимости $C_p(T)$ (кривая 1) и фрагмент изменения среднего по объему параметра дальнего порядка в сплаве (кривая 2)

Для понимания физического смысла такой функциональной зависимости $C_p(T)$ необходимо обратить внимание на следующие моменты. Во-первых, максимум на зависимости $C_p(T)$ на рисунке 4 приходится на верхнюю температуру двухфазной области (рис. 3). Во-вторых, начало отклонения зависимости $C_p(T)$ от линейной начинается на температуре начала двухфазной области $D1_a + A1$. В-третьих, начало

нелинейности на зависимости $C_p(T)$ совпадает с началом уменьшения параметра дальнего порядка η . В-четвертых, резкий спад $C_p(T)$ после T_k соответствует полному исчезновению ДП, а плавный выход выше T_k на линейную зависимость обусловлен разрушением ближнего порядка в высокотемпературной фазе A1 на основе ГЦК решетки (рис. 4).

Таблица 2

Структурные и термодинамические характеристики сплавов Ni₄Mo

Сплав	T_k , К	$\Delta\eta$ в T_k	$\Delta V/V$, %	ΔH , Дж/Моль	ΔS_{η} , Дж/К	ΔS_p , Дж/К
Ni ₄ Mo,	1149±3	0.85	0.23	5054	4.74	4.16

Интегральное значение выделившегося при разупорядочении тепла пропорционально площади, за-

нимаемой пиком (рис. 4, кривая 1).

Анализ полученных экспериментальных данных проводился на основе представления функциональной зависимости $C_p(T)$ в виде суммы [21, 22].

$$C_p = C_l + C_k + \Delta, \quad (1)$$

где C_l — решеточная теплоемкость; C_k — конфигурационная теплоемкость; Δ — поправка на тепловое расширение решетки. Поскольку вклады в теплоемкость C_l и Δ изменяются монотонно с температурой [23], постольку их сумма ($C_l + \Delta$) определяет регулярную часть теплоемкости [21]. Расчет регулярной части $C_p(T)$ проведем в приближении Коппа-Неймана (К-Н) [21]. Это позволяет в нулевом приближении рассчитать регулярную (линейную по концентрации) часть

теплоемкости на основе теплоемкостей компонент сплава. Приближение К-Н запишем как:

$$C_{AB}^{nm} = nC_A + mC_B, \quad (2)$$

здесь n, m — атомные концентрации компонент сплава; C_A, C_B — теплоемкости компонентов A и B соответственно.

Для металлов Ni и Mo теплоемкость $C_p(T)$ рассчитываем по формуле [24, 25]:

$$C_p = 4.9168(a + 10^{-3}bT + 10^{-5}cT^2), \quad (3)$$

a, b, c — константы, экстраполируемые на зависимости C_p для элементов Ni и Mo, представлены в таблице 3.

Таблица 3

Константы теплоемкости для металлов Ni и Mo [26, 27]

Элементы	a	b	c
Ni	7,80	-0.47	-1.335
Mo	5,77	0.28	-

На основе формул (1) и (2) была рассчитана регулярная часть $C_p(T)$ для сплава Ni₄Mo и представлена на рисунке 4 (кривая 2).

Поправка на тепловое расширение решетки рассчитывалась по формуле [23]:

$$\Delta = 1.5 \cdot 10^{-4}TC_p, \quad (4)$$

где T — абсолютная температура; C_p — удельная теплоемкость при фиксированной температуре T . Можно констатировать, что приближение К-Н плохо выполняется для соединения Ni₄Mo. В общем случае для этого сплава нужно отметить следующие вклады в теплоемкость: решеточный, электронный и конфигурационный. Последний вклад существен только в области превращения. Линейный ход кривой $C_p(T)$ свидетельствует о том, что вплоть до области перехода ангармонизм кристаллической решетки мал, а гармонический вклад и электронный в теплоемкость разделить не удастся.

Согласно литературным данным [10], энтальпии ФП порядок — беспорядок для сплавов заключены в интервале значений 0,5–2 кДж/моль.

Исключения составляют сплавы Ni₃Fe и Ni₃Mn, в которых ФП порядок — беспорядок происходят одновременно с магнитными переходами из ферромагнитного в парамагнитное состояние (энтальпии превращений равны 4.26 и 4.73 кДж/моль соответственно). Кроме того, в сплавах, в которых ФП порядок — беспорядок происходит одновременно еще со структурными превращениями с изменениями сингонии кристаллической решетки, значение энтальпии ФП значительно выше указанного интервала значений.

Это явление находит также подтверждение в сплаве Cu-40 ат% Pd, в котором ФП порядок — беспорядок происходит одновременно со структурным превращением B2→A1. Для этого случая энтальпия ФП B2→A1 равна 8.65 кДж/моль [26].

Изменение энтропии (ΔS_p) при ФП $D1_a \rightarrow A1$ в сплаве Ni₄Mo рассчитывалось по аномальной части $C_p(T)$ (рис. 4) по формуле [26]:

$$\Delta S_p = \int_{T_1}^{T_2} \Delta C_p(T) d \ln T, \quad (5)$$

здесь T_1 — температура начала превращения П-Б; T_2 — температура окончания превращения П-Б; $\Delta C_p(T)$ — разница между регулярной частью $C_p(T)$ и аномальной частью $C_p(T)$ сплава. Значение (ΔS_p), вычисленное по формуле (4), представлено в таблице 2.

В приближении теории Горского-Брэгга-Вильямса было проведено вычисление энтропии ΔS_T перехода $D1_a + A1$ [27, 28]. Результаты расчета представлены в таблице 2. Сравнение экспериментально найденных значений ΔS_p с вычисленными значениями ΔS_T свидетельствует о том, что в сплаве Ni₄Mo при ФП П-Б основную роль играет конфигурационный вклад.

Теоретические расчеты термодинамических характеристик сплава Ni₄Mo

Проведены расчеты из первых принципов термодинамических характеристик соединений в системе Ni-Mo. Эталонная решетка с полной структурной информацией была найдена в кристаллографической базе COD (табл. 2) [15] и уточнена в коде CASTEP [16] при 0 К [16]. На рисунке 1 приведено 3D изображение

решетки Ni_4Mo . На основе теоретических расчетов были получены энтальпии образования соединений в системе Ni-Mo, которые представлены на диаграмме

на рисунке 5. На этой же диаграмме приведены данные расчетов энтальпии образования соединений, рассчитанные из первых принципов по данным работы [29].

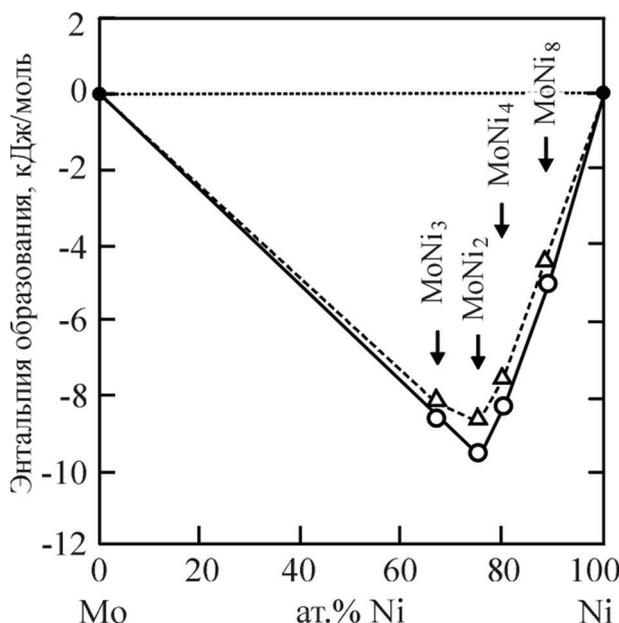


Рис. 5. Теоретически рассчитанные из первых принципов энтальпии образования соединений в системе Ni-Mo, по (---) данным работы [29] и по данным настоящей работы (—)

Наблюдается хорошее совпадение наших расчетов с данными работы [29]. Видно, что минимум энтальпии на концентрационной кривой приходится на соединение Ni_3Mo . Это свидетельствует о том, что наиболее стабильным в этой системе является соединение Ni_3Mo . Здесь необходимо отметить, что соединение δ -NiMo нестабильно при 0 K. Это противоречит известным фазовым диаграммам в системе Ni-Mo [11]. Теоретические расчеты энтальпии образования соединения Ni_4Mo дают значение 8,3 кДж/моль.

Выводы

В заключение следует отметить, что особенности в поведении на температурной зависимо-

сти $C_p(T)$ сплава Ni_4Mo характерны для размытого фазового перехода. Установлено, что начало отклонения на температурной зависимости $C_p(T)$ от линейной коррелирует с началом образования двухфазного состояния $D1_a + A1$ и началом уменьшения атомного дальнего порядка в сверхструктуре $D1_a$. Установленные температурные зависимости параметра дальнего порядка $\eta(T)$ и теплоемкости $C_p(T)$ свидетельствуют о существовании в области ФП $D1_a \rightarrow A1$ предпереходных структурных состояний, которые трудно зафиксировать при помощи закалки образцов из высокотемпературных областей.

Библиографический список

1. Симс Ч.Т. Суперсплавы II: Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок. Кн. 1. М., 1995.
2. Cheng X.Y., Wan X.J. The effect of ordering on the environmental embrittlement of Ni_4Mo alloy // Scripta Materialia. 2002. Vol. 46. № 6.
3. Genc A., Ovecoglu M.L., Baydogan M., Turan S. Fabrication and characterization of Ni-W solid solution alloys

via mechanical alloying and pressureless sintering // Materials and Design. 2012. Vol. 42.

4. Козлов Э.В., Клопотов А.А., Поткаев А.И. и др. Рентгеноструктурные исследования изменения атомного дальнего порядка в сплаве Ni_4Mo со сверхструктурой $D1_a$ // Наноматериалы и нанотехнологии : VI Междунар. конф. Улан-Удэ, 2016.

5. Федорищева М.В., Клопотов А.А., Потехаев А.И. и др. Особенности фазового перехода порядок — беспорядок в упорядочивающихся сплавах Ni_4Mo и Ni_4W со сверхструктурой $D1_a$. // Упорядочение в минералах и сплавах ОМА-20: XX Междунар. симпозиум. Ростов н/Д, 2017.
6. Fedorischeva M.V., Klopotov A.A., Potekhaev A.I. et al. Features of the Order–Disorder Phase Transition during the Ordering of Ni_4Mo and Ni_4W Alloys with $D1_a$ Superstructure. Bulletin of the Russian Academy of Sciences // Physics. 2018. Vol. 82. № 7.
7. Kingetsu T., Yamamoto M., Nenno S. Orientation dependence of surface energy change on ordering in Ni_4Mo alloy // Surface Science Letters. 1984. Vol. 146. № 1–2.
8. Yamamoto M., Seidman D.N. The quantitative compositional analysis and field-evaporation behavior of ordered Ni_4Mo on an atomic plane-by-plane basis: An atom-probe field-ion microscope study // Surface Science, 1983. Vol. 129. № 1–2.
9. Козлов Э.В., Пушкарева Г.В., Кушнаренко В.М., Конева Н.А. Исследование роста антифазных доменов в сплаве Ni_4Mo // Известия вузов. Физика. 1977. № 1.
10. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. М., 1989.
11. Диаграммы состояния двойных металлических систем / под ред. Н.П. Лякишева. М., 1996–2000. Т. 1–3.
12. Миркин Л.М. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. М., 1961.
13. Ягфаров М.Ш. Новый метод измерения теплоемкостей и тепловых эффектов // Журнал физической химии. 1969. Вып. 6.
14. Черепнин В.Т. Экспериментальная техника в физическом металловедении. Киев, 1968.
15. Кристаллография. Открытая база данных // Сайт «Crystallography Open Database». URL: <http://www.crystallography.net/cod/> (дата обращения 15.10.2021).
16. Clark S.J., Segall M.D., Pickard C.J. et al. First principles methods using CASTEP. Zeitschrift fuer Kristallographie. 2005. Vol. 220 (5–6).
17. Универсальные дескрипторы фрагментов для прогнозирования свойств неорганических кристаллов // Сайт «AFLOW Automatic — FLOW for Material Discovery». URL: <http://afowlib.org/afow-ml/> (дата обращения 15.10.2021).
18. Rechinger W.A. A Correction for α_1, α_2 Doublet in the Measurement of Widths of X-Ray Diffraction Lines. // J. Scient. Instr. 1948. Vol. 25.
19. Harker D. The Crystal Structure of Ni_4Mo // The J. of the Chem. Phys. 1944. Vol. 12. № 7.
20. Ролов Б.Н. Размытые фазовые переходы. Рига, 1972.
21. Hoch M., Vernardakis T. Specific Heat and Thermal Expansion of Solids at High Temperature // Scri. Met. 1975. Vol. 9.
22. Резницкий Л.А. Калориметрия твердого тела. М., 1981.
23. Hoffman J.A., Paskin A., Tauer K.J., Weise R.J. Analysis of Ferromagnetic and Antiferromagnetic Second-Order Transitions // J. Phys. Chem. Sol. 1956. Vol. 1. № 1.
24. Свеллин Р.А. Термодинамика твердого состояния. М., 1968.
25. Таблицы физических величин. Справочник. М., 1976.
26. Клопотов А.А., Тайлашев А.С., Попов С.Н. и др. Тепловые эффекты превращений B2-A1 в сплаве CuPd // Известия вузов. Физика. 1993. № 2.
27. Смирнов А.А. Молекулярно-кинетическая теория металлов. М., 1966.
28. Кривоглаз М.А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов. М., 1967.
29. Zhou S.H., Wang Y., Jiang C., Zhu J.Z., Chen L.-Q., Liu Z.-K. First-principles calculations and thermodynamic modeling of the Ni-Mo system // Materials Science and Engineering A. 2005. Vol. 397.