

*На правах рукописи*



**Петров Николай Иванович**

**Исследование процессов разупорядочения кристаллов при их  
росте из двухкомпонентных металлических расплавов**

**Специальность 01.04.07 –  
«Физика конденсированного состояния»**

**Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук**

**МОСКВА 2017**

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «**Российском химико-технологическом университете имени Д. И. Менделеева**» на кафедре физики

**Научный руководитель:** доктор физико-математических наук, профессор  
**Байков Юрий Алексеевич**

**Официальные оппоненты:** **Новиков Владимир Васильевич**  
доктор физико-математических наук, профессор,  
директор УИЦ «Брянская физическая лаборатория»,  
профессор кафедры экспериментальной и теоретической  
физики физико-математического факультета  
Брянского Государственного университета  
им. академика Г.И. Петровского

**Бардушкин Владимир Валентинович**  
доктор физико-математических наук, доцент,  
профессор кафедры Высшей математики № 2,  
профессор кафедры системной среды качества  
Национального исследовательского университета  
«Московский институт электронной техники»

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики твердого тела РАН»

**Защита состоится «23» ноября 2017 г. в 15.30 часов** на заседании диссертационного совета Д 212.132.08 на базе Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС" по адресу 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 6 строение 2, ауд. А-305.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС» и на сайте [www.misis.ru](http://www.misis.ru)

**Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.**

Ученый секретарь  
Диссертационного совета Д 212.132.08

доктор физико-математических наук, профессор



**С.И. Мухин**

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертация соответствует паспорту ВАК специальности **01.04.07** – «**Физика конденсированного состояния**». Основой специальности является теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях. Разработана математическая модель построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения.

**Актуальность исследования:** Современное развитие науки и техники в области физики и металлургии вызывает необходимость создания новых металлических материалов с особыми физическими, механическими и химическими свойствами. При создании современных металлических материалов, отвечающих требованиям практического их использования, весьма насущным является изучение физической природы фазовых переходов при образовании кристаллических систем в зависимости от выбранной модели микрорекристаллизации. Особое самостоятельное значение имеет развитие теории фазовых переходов и соответствующих им физических эффектов в концентрированных кристаллических фазах, формирующихся из различных исходных маточных сред. Значительное место в науке о фазовых переходах в твердых телах и в связанных с ними термодинамических системах, из которых они образуются, занимают процессы кристаллизации. При кристаллизации одно- и многокомпонентных металлических расплавов существенную роль должна играть морфология поверхности раздела двух соприкасающихся фаз системы расплав-кристалл.

В настоящее время весьма актуальным является вопрос о дальнейшем более детальном изучении морфологии растущей поверхности раздела фаз металлический расплав-кристалл. Актуальность учета особенностей строения поверхности и ее конечных размеров следует из следующего. В свое время были предприняты попытки по созданию общей теории роста кристаллов, в частности была предложена теория движущейся поверхности раздела фаз Дж. Кана (см. [10 – 12]). Основная трудность этой теории заключалась в том, что рассмотренная в ней структура поверхности раздела фаз не содержала элементов взаимодействия между частицами этой поверхности, а заменялась эквивалентной ей диффузионной областью. Она оказалась неприменимой к случаям кристаллизации металлических одно- и многокомпонентных расплавов, что подтвердилось данными по кинетике роста кристаллов в ряде надежных экспериментов (см. [13]). Учет особенностей взаимодействия атомов или молекул на границе раздела соприкасающихся фаз, связанных с

морфологией поверхности раздела, в случае кристаллизации двух- или многокомпонентных расплавов или иных исходных физических сред приводит к кинетическим эффектам, связанным с процессами разупорядочения образующейся кристаллической фазы, т.е. приводит к реализации процессов порядок-беспорядок или ориентировано растущих кристаллических пленок из различных исходных маточных фаз (процессов эпитаксии и эндотаксии). В ряде работ высказывалась мысль о наличии неких локальных перемещений частиц твердого состояния в области раздела фаз металлический расплав-кристалл в окрестности кинетического равновесия исследуемых одно- и многокомпонентных систем. Эти локальные перемещения, которые иначе можно назвать флуктуациями концентраций частиц твердого состояния, играют существенную роль в процессах микрокристаллизации металлических систем в области малых и конечных переохлаждений  $\Delta T$ . Проблема изучения подобных флуктуаций и сопутствующих им физических процессов весьма актуальна.

**Цель исследования.** Целью настоящего исследования является изучение процессов разупорядочения двухкомпонентных металлических кристаллов стехиометрического состава с простой кубической элементарной решеткой, растущих из **50%** двухкомпонентных металлических расплавов, и сопутствующих им особенностей кинетики роста самих кристаллов с учетом зависимости частот присоединения мономеров роста от энергий их связи в первом приближении с ближайшими мономерами роста, образующими изломы на ступени в модели ПДЗ и от температуры границы раздела системы двухкомпонентный расплав-кристалл. Для достижения поставленной цели были сформулированы **следующие задачи:**

1) Описать структуру переходной двухфазной зоны в пространстве концентраций в случаях зависимости частот присоединения и отрыва мономеров роста в слоях ПДЗ с учетом зависимости от энергии взаимодействия мономеров роста в первом приближении и от температуры (переохлаждение системы 50% двухкомпонентный расплав-кристалл в кинетическом режиме кристаллизации).

2) Провести термодинамический анализ кристаллизующейся системы расплав-кристалл в бездиффузионном режиме кристаллизации в окрестности температуры разупорядочения.

3) Выяснить особенности процесса разупорядочения кристаллической двухкомпонентной системы в кинетическом режиме кристаллизации в приближении Брэгга-Вильямса.

4) Описать кинетику процесса кристаллизации ПДЗ в области температуры разупорядочения в бездиффузионном режиме кристаллизации.

5) Использовать математический аппарат теории результатов для определения характера обращения в нуль параметра дальнего порядка в окрестности точки разупорядочения в кинетическом режиме кристаллизации.

6) Установить особенности кинетики роста двухкомпонентной кристаллической фазы из **50%** двухкомпонентных металлических расплавов при достижении температуры разупорядочения двухкомпонентного кристалла.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1) В приближении Брэгга–Вильямса на процесс разупорядочения двухкомпонентной кристаллической системы в кинетическом (бездиффузионном) режиме кристаллизации топология переходной двухфазной зоны не оказывает влияние на закон стремления параметра дальнего порядка к нулю в окрестности точки разупорядочения.

2) В окрестности точки разупорядочения кристаллической металлической системы в бездиффузионном режиме кристаллизации средняя скорость кристаллизации переходной двухфазной зоны испытывает угловую особенность, т.е. испытывает скачок на величину, пропорциональную  $\eta^2$

3) Структуру переходной двухфазной зоны в кинетическом режиме кристаллизации с учетом зависимости частот обмена мономерами роста между соприкасающимися массивными фазами от энергии взаимодействия частиц (мономеров роста) и температуры кристаллизации системы (переохлаждения) можно описать системой кинетических стационарных уравнений.

4) Математическая теория результатов в кинетическом режиме кристаллизации переходной двухфазной зоны позволяет выявить истинный закон стремления параметра дальнего порядка к нулю (классический термодинамический переход Брэгга–Вильямса).

5) Учет зависимости частоты обмена мономерами роста между расплавом и кристаллом в обоих направлениях от структуры и состава виртуальной переходной двухфазной области, а также от температуры кристаллизации сказывается на положении точки разупорядочения кристаллической двухкомпонентной системы. Требуется большее переохлаждение двухкомпонентной металлической системы для реализации процесса разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы. В указанных приближениях разупорядочения Брэгга–Вильямса топология ПДЗ (ее ступенчатая форма) не оказывает влияния на закон разупорядочения.

**Научная новизна:**

1) Впервые представлены различные варианты кинетических дифференциально-разностных уравнений, описывающих стационарную структуру виртуальной ПДЗ системы **50%** двухкомпонентный металлический

расплав-кристалл с учетом зависимости обеих частот обмена мономерами роста между соприкасающимися фазами расплава и кристалла от структуры двухкомпонентной ПДЗ и температуры кристаллизующейся системы в кинетическом режиме кристаллизации.

2) На основе выбранного кинетического дифференциально-разностного уравнения впервые получена замкнутая система трансцендентных математических уравнений, описывающая эволюцию двухкомпонентной ПДЗ с учетом зависимости частоты присоединения мономеров роста к кристаллической фазе от структуры ПДЗ и температуры кристаллизации **50%** двухкомпонентного металлического расплава в кинетическом режиме кристаллизации.

3) Впервые применена математическая теория результатов для определения температуры разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы. Показано, что температура разупорядочения значительно меньше температуры кинетического равновесия системы расплав-кристалл.

4) Получены усовершенствованные уравнения для описания кинетики кристаллизации **50%** двухкомпонентных металлических расплавов с учетом зависимости обеих частот обмена мономерами роста между двухкомпонентным расплавом и кристаллом от структуры ПДЗ и температуры кристаллизующейся системы в кинетическом режиме кристаллизации.

5) Отмечено, что учет зависимости частоты присоединения мономеров роста к кристаллической двухкомпонентной фазе от структуры ПДЗ и температуры кристаллизации не меняет характер закона разупорядочения двухкомпонентной металлической кристаллической фазы в приближении Брэгга-Вильямса (влияние топологии модели ПДЗ на разупорядочение отсутствует). Однако частицы (мономеры роста в модели ПДЗ в пространстве концентраций), образующие излом на поверхности раздела двух соприкасающихся фаз, получили возможность «выбирать» нужную частицу из хаотического двухкомпонентного расплава. Этим идеальная система приближена к более реальной кристаллизующейся системе двухкомпонентный металлический расплав-кристалл.

6) Впервые представлены константы, характеризующие среднюю скорость кристаллизации **50%** двухкомпонентных металлических расплавов в окрестности температуры разупорядочения при учете зависимости частоты присоединения мономеров роста к кристаллу от структуры ПДЗ и температуры кристаллизации.

### **Научная и практическая значимость:**

Полученные в результате проведенных научных исследований данные имеют общий характер и применимы для любых двухкомпонентных металлических кристаллов с простой кубической элементарной ячейкой и стехиометрического состава, растущих из **50%** двухкомпонентных металлических расплавов в бездиффузионном режиме. В этом заключается их научная и практическая значимость. Научная значимость подтверждается тем обстоятельством, что использованная модель микрокристаллизации двухкомпонентных расплавов в модели ПДЗ наиболее близка к реально наблюдаемым на эксперименте процессам обмена частицами между двумя соприкасающимися массивными фазами, находящимися в разных агрегатных состояниях. Полученные результаты исследования процессов разупорядочения двухкомпонентных кристаллов с простой кубической решеткой учитывали возможность выбора частиц из хаотического двухкомпонентного расплава элементами структуры кристаллической фазы. Эти результаты позволяют давать практические рекомендации в ряде отраслей промышленности и техники, которые специализируются выращиванием двухкомпонентных металлических кристаллов с совершенной внутренней упорядоченной структурой в бездиффузионном режиме кристаллизации.

### **Степень достоверности:**

Степень достоверности полученных результатов с усовершенствованной моделью кристаллизации подтверждается адекватными данными, известными из научной литературы с более простыми моделями обмена частицами (мономерами роста в виртуальной ПДЗ) между соприкасающимися массивными фазами двухкомпонентных систем расплав-кристалл. Это относится как к характеру изменения параметра дальнего порядка по мере приближения к температуре разупорядочения, так и к кинетике эволюции самой ПДЗ в этой области.

### **Личный вклад:**

Автор провел подробное изучение флуктуационной теории нормального роста одно- и двухкомпонентных металлических кристаллов из соответствующих расплавов, что позволило ему получить усовершенствованные уравнения для описания кинетики кристаллизации **50%** двухкомпонентных металлических расплавов с учетом зависимости обеих частот обмена мономерами роста между двухкомпонентным расплавом и кристаллом от структуры ПДЗ и температуры кристаллизующейся системы в кинетическом режиме кристаллизации. Внимательно изучив математическую теорию результатов, автор успешно применил ее в настоящей работе для

определения температуры разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы. Автор принимал непосредственное участие в обсуждении полученных научных данных и в подготовке материалов для статей и докладов.

### **Апробация работы:**

Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях, тезисы которых опубликованы в научных сборниках докладов:

1) Ю.А.Байков, Н.И.Петров «Флуктуационный механизм нормального роста кристаллов» //Труды научной сессии Центра хемотроники стекла им. В.В.Тарасова, посвященной 100-летию со дня рождения профессора Б.Т.Коломийца. М., РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2008.

2) Ю.А.Байков, Н.И.Петров «Фазовые переходы в конденсированных системах» //Международная научная сессия «Воспоминания об академике Сироте Н.Н.», М, МГУП, 2013.

3) Ю.А.Байков, Н.И.Петров «Исследование процессов разупорядочения в двухкомпонентных кристаллах» //Международная конференция «Физика конденсированных сред и дисперсных систем» //М, МГОУ, 2014.

### **Объем и структура работы:**

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и пяти приложений. Полный объем диссертации составляет **180** страниц текста, **16** рисунков. Список литературы содержит **100** наименований.

## **КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ**

**Во введении** обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи, выносимые на защиту, раскрыты научная новизна работы и практическая значимость результатов исследования.

**В главе 1** представлен общий обзор и критический анализ существующих в настоящее время представлений известных авторов по проблемам кристаллизации твердых тел из различных исходных маточных фаз, в том числе из металлических расплавов. При этом особо обращено внимание на особенности процессов разупорядочения **50%** кристаллических сплавов и их связей с кинетикой формирования двухкомпонентных кристаллов в области конечных переохлаждений системы двухкомпонентный расплав-кристалл.

Всякое сложное перемещение вакансий в теле кристалла и возникающая при этом сложная структура кристалла сводится к суперпозиции рассматриваемых элементарных движений вакансий в вертикальных и горизонтальных направлениях (см. [1, 2, 3]).



Если двухкомпонентная маточная кристаллизующаяся среда не упорядочена по отношению к распределению частиц «А» и «В» (парогазовая смесь, расплав), а акты присоединения частиц у изломов ступени растущей кристаллической поверхности случайны, то кинетическое значение параметра дальнего порядка  $\eta$ , определяемого в случае простой

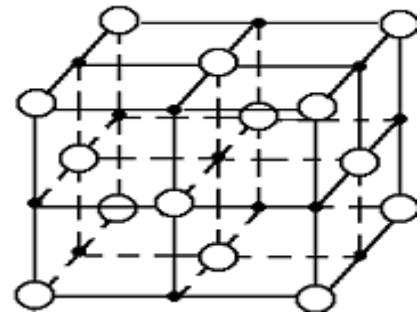


Рис.1 Схема простой кубической решетки

кубической системы как  $\eta = \frac{W_A - W_B}{W_A + W_B}$ , где  $W_A$  и  $W_B$  – вероятности занять фиксированный узел 1 элементарной ячейки атомом сорта «А» или «В» соответственно (см. рис.1), должно быть меньше равновесного термодинамического. При  $W_A = W_B$  двухкомпонентный кристалл находится в полном беспорядке. При  $W_A = 1, W_B = 0$  наступает полная упорядоченность в двухкомпонентной кристаллической фазе. Эти же определения в равной степени относятся к любому узлу простой кубической решетки.

Выяснение роли морфологии поверхности раздела двух массивных фаз в случае двухкомпонентной системы металлический расплав-кристалл представляется весьма удобным посредством введения понятия переходной двухфазной зоны, наличие которой доказано в результате экспериментальных исследований кристаллизации металлов и сплавов. Реальные переходные двухфазные зоны, состоящие из реальных частиц обоих агрегатных состояний (жидкий расплав и кристаллическая двухкомпонентная фаза), заменялись соответствующими виртуальными двухкомпонентными двухфазными зонами в пространстве концентраций мономеров роста (см. рис.2). Эти виртуальные двухфазные зоны, находящиеся на границе двух массивных фаз – кристалла и двухкомпонентного металлического расплава, отвечали основным требованиям реальных двухкомпонентных переходных зон, а именно:

- 1) конечность размеров (число одноатомных монослоев  $n_0$  – конечное);
- 2) топологическая (структурная) форма ПДЗ сходна с формой ступени с изломами на поверхности раздела фаз расплав – кристаллов в модели Косселя – Странского;
- 3) с ростом номера монослоя ПДЗ ( $i \rightarrow n_0$ ) ( $i = 1, 2, 3, \dots, n_0$ ) концентрация мономеров роста твердого состояния убывает, а жидкого соответственно возрастает.

Этих трех основных требований оказывается достаточно для описания эволюции ПДЗ в кинетическом режиме кристаллизации системы 50% двухкомпонентный металлический расплав – кристалл. Эти требования могут

быть реализованы, если принять, что вышеупомянутая модель ПДЗ может быть реализована за счет действия в моноатомных слоях переходной области флуктуационного механизма изменения агрегатного состояния частиц с ограниченным спектром. Это означает, что после флуктуации концентрации мономеров роста в  $i$ -том монослое, последняя не может быть выше соответствующей концентрации мономеров роста твердого состояния в ближайшем левом ( $i - 1$ ) и не может быть ниже подобной же концентрации в ближайшем правом ( $i + 1$ ) монослое в дофлуктуационный момент времени.

На рис.2 представлены схемы ПДЗ системы двухкомпонентный расплав-кристалл, образованной действием флуктуационного механизма с ограниченным спектром изменения средних концентраций мономеров роста твердого состояния во всех моноатомной толщины слоях переходной двухфазной зоны. Под мономером роста в виртуальной модели ПДЗ в пространстве концентраций понимается величина, являющаяся аналогом частицы в реальной переходной области расплав-кристалл и обозначаемая как  $\alpha N^{-1}$ , где  $\alpha$  - параметр, отмечающий сорт мономера роста ( $\alpha = A, B$  для двухкомпонентной системы),  $N$  - полное количество частиц обоих сортов и обоих агрегатных состояний в каждом из  $i$  монослоев виртуальной ПДЗ ( $i = 1, 2 \dots, n_0$ ). Величины  $\langle x_{ii} \rangle$  означают усредненные значения концентраций мономеров роста твердого состояния в моноатомной толщины слое « $i$ » в момент дискретного времени  $t_i = t_0 + i\tau$  ( $t_0$  - начальный момент времени,  $\tau$  - длительность одной спонтанной тепловой равновесного типа флуктуации концентраций мономеров роста твердого состояния, постоянная для всех монослоев ПДЗ). Соответственно  $\langle x_{i-1i-1} \rangle, \langle x_{i+1i-1} \rangle$  - средние значения концентраций мономеров роста твердого состояния в слоях ( $i - 1$ ) и ( $i + 1$ ) ПДЗ в дофлуктуационный момент времени  $t_{i-1} = t_0 + (i - 1)\tau$ . Заштрихованная часть  $i, i - 1, i + 1$  - слоев переходной зоны двухфазной области означает величины  $\langle x_{ii} \rangle, \langle x_{i-1i-1} \rangle, \langle x_{i+1i-1} \rangle$  и т.д. Незаштрихованная часть каждого слоя  $i$  ( $i = 1, 2 \dots, n_0$ ) ПДЗ отмечает концентрацию мономеров роста, находящихся в двухкомпонентном расплаве. Общее число мономеров роста обоих агрегатных состояний в каждом из  $i$ -слоев ( $i = 1, 2 \dots, n_0$ ) равно  $N$ .

Модель переходной двухфазной зоны (ПДЗ) в пространстве концентраций в случае кристаллизации 50% двухкомпонентных металлических расплавов при образовании кристаллической двухкомпонентной матрицы с простой кубической решеткой и стехиометрического состава позволяет одновременно с рассмотрением классических особенностей роста кристаллов изучить процессы типа порядок-беспорядок.

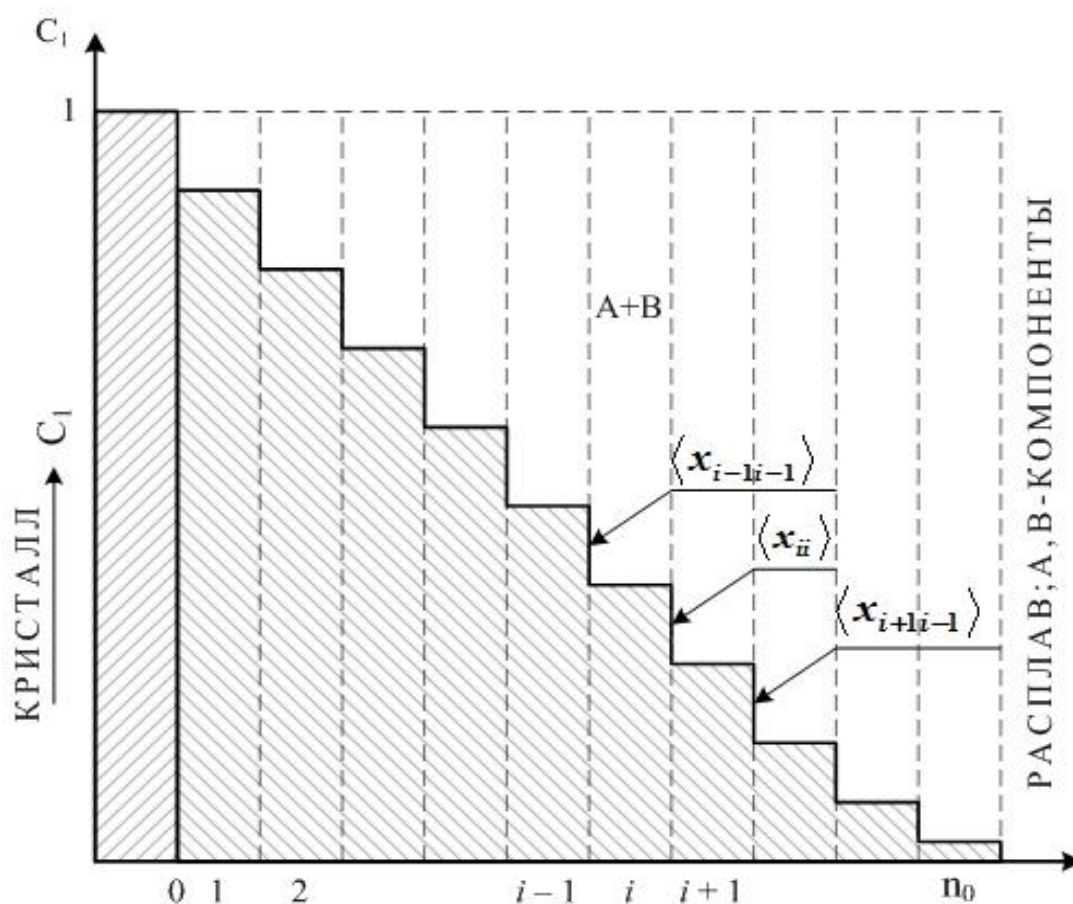


Рис.2 Физическая схема переходной двухфазной зоны в пространстве концентраций, состоящей из  $n_0$  монокатомной толщины слоев для двухкомпонентной системы (A+B) расплав-кристалл и образованной спонтанными флуктуациями с ограниченным спектром изменения концентраций мономеров роста твердого состояния.

В главе 2 описана и исследована структура переходной двухфазной зоны (ПДЗ) при кристаллизации 50% металлических двухкомпонентных расплавов. При этом отмечены возможные режимы процессов кристаллизации металлических расплавов, а также аналогии между структурой ПДЗ, образованной флуктуационными механизмами концентраций мономеров роста твердого состояния, и моделью поверхности кристалла Косселя, разделяющей соприкасающиеся массивные фазы. Особо отмечены тип, характеристики и свойства элементов математического аппарата, используемого при описании процессов кристаллизации в модели ПДЗ. Указаны особенности физических ограничений на параметры кристаллизующихся систем как на микро, так и макроуровнях для случаев кристаллов стехиометрического состава с простой кубической решеткой.

На рис. 3 показана модель ПДЗ в пространстве концентраций, имеющих «ступенчатую» форму и обычно встречающуюся при кристаллизации двухкомпонентных расплавов вследствие действия механизма спонтанных флуктуаций с «ограниченным» спектром изменения концентраций частиц твердого состояния (мономеров роста в модели ПДЗ). По оси абсцисс отложены

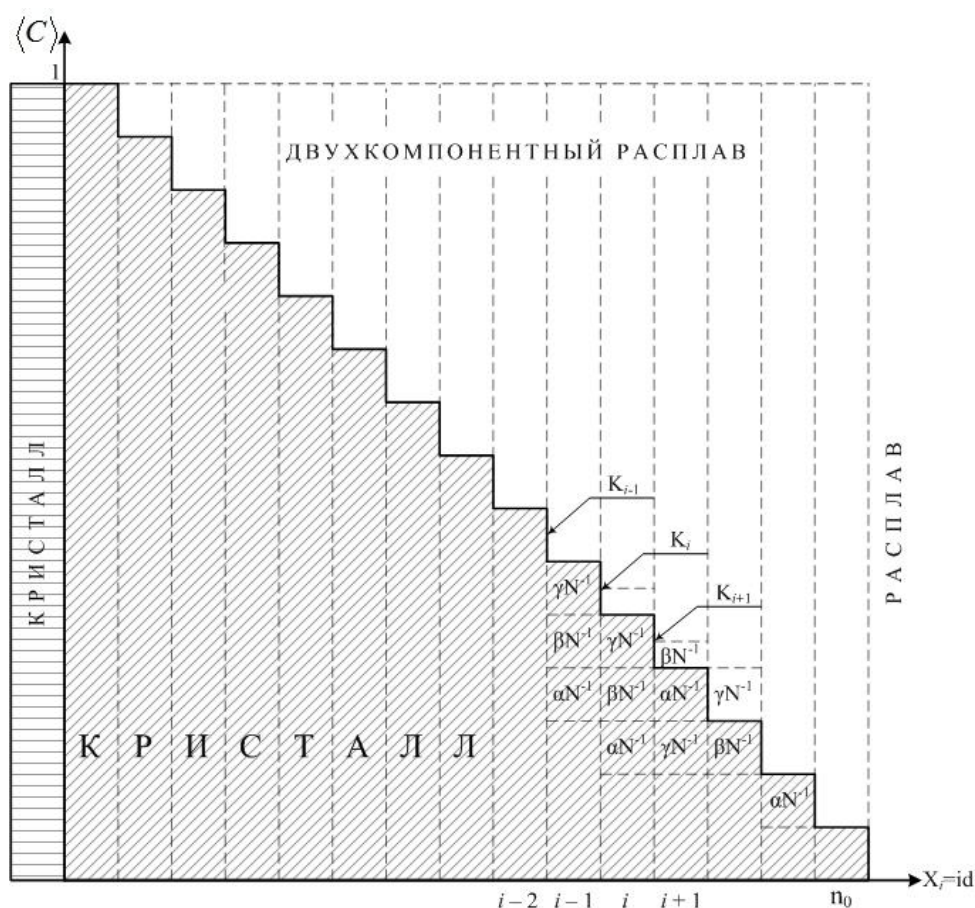


Рис.3 Модель ПДЗ «ступенчатой» формы в пространстве концентраций для двухкомпонентной системы расплав-кристалл с указанием изломов и номеров роста

номера моноатомной толщины слоев в общем количестве  $n_0$ , отделяющих собой кристалл от двухкомпонентного металлического расплава. По оси ординат отложены величины концентраций мономеров роста твердого состояния  $C_i = \frac{m_i}{N}$  в каждом моноатомной толщины « $d$ » слое переходной двухфазной зоны, где  $m_i$  – число частиц твердого состояния в  $i$ -том слое,  $N$  – общее количество частиц обоих состояний (жидкого и кристаллического), которое считается одинаковым для всех монослоев ПДЗ ( $i = 1, \dots, n_0$ ). Каждый заштрихованный столбик в случае двухкомпонентной системы расплав-кристалл предполагается состоящим из конечного числа так называемых мономеров роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ ,  $\gamma N^{-1}$  и т.д., где  $\alpha, \beta, \gamma = A, B$  – индексы, отмечающие сортность того или иного мономера роста, каждый из которых находится в кристаллическом состоянии (кристаллической двухкомпонентной фазе). Незаштрихованная часть каждого  $i$ -го столбика представляет собой определенное количество мономеров роста разных сортов, находящихся в расплаве (двухкомпонентная жидкая фаза). Для описания структуры ПДЗ, формируемой в результате действий различных флуктуационных механизмов мономеров роста твердого состояния, вводятся понятия изломов границы раздела двух соприкасающихся двухкомпонентных

фаз (кристаллической и жидкой). Эти изломы количественно характеризуются высотами  $K_{i-1}, K_i, K_{i+1}$  ( $i = 1, \dots, n_0 - 1$ ), которые определяются в виде разностей усредненных концентраций мономеров роста в соседних монослоях переходной двухфазной зоны, находящихся в кристаллическом состоянии:  $K_{i-1} = \langle C_{i-1} \rangle - \langle C_{i-2} \rangle$ ,  $K_i = \langle C_i \rangle - \langle C_{i-1} \rangle$ ,  $K_{i+1} = \langle C_{i+1} \rangle - \langle C_i \rangle$  и т.д. Усреднение этих концентраций производится в соответствии с функциями распределения вероятностей реализации различных механизмов вышеупомянутых флуктуаций. Сама переходная двухфазная зона является трехмерной.

На рис.4 представлены варианты сечений различных фрагментов ПДЗ плоскостью  $Z=0$  (плоскостью рисунка) в зависимости от знаков и величин изломов пограничной области на примере трех соседних слоев ( $i-1$ ),  $i$ , ( $i+1$ ).

а)  $K_i > 0, K_{i+1} < 0$     б)  $K_i > 0, K_{i+1} \geq 0$     в)  $K_i \leq 0, K_{i+1} < 0$     г)  $K_i < 0, K_{i+1} > 0$

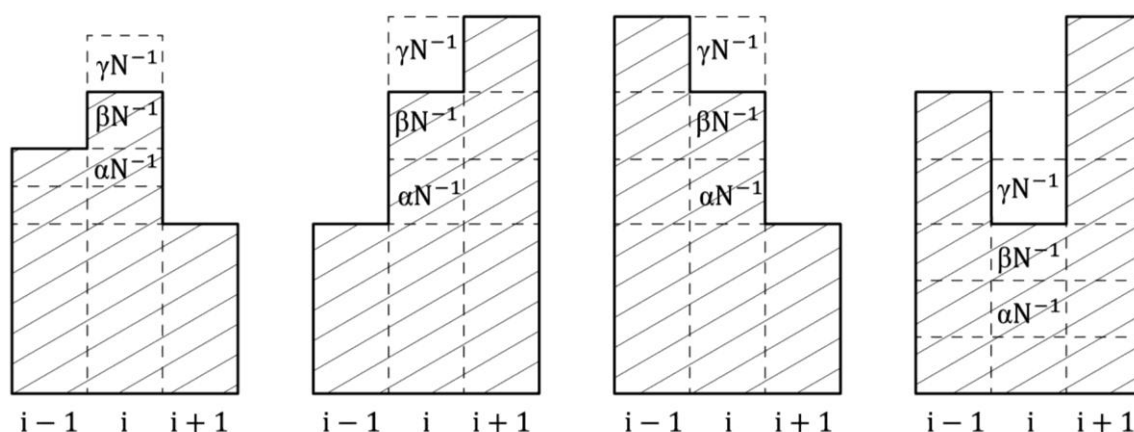


Рис.4 Варианты изломов в модели ПДЗ, образуемых мономерами роста в пространстве концентраций на примере трех монослоев. Штрихи отмечают кристаллическую фазу двухкомпонентной системы.

Эволюция самой ПДЗ в процессе обмена мономерами роста между расплавом и кристаллом двухкомпонентной системы в виде изменения конфигурации границы фаз происходит в плоскости  $Z=0$  (плоскости рисунков 2 или 3). Процессам разложения кристаллической двухкомпонентной фазы, имеющей простую кристаллическую решетку типа  $NaCl$  и состоящей из двух подрешеток с чередующимися узлами, отмечаемыми индексами  $j, k$  ( $j, k = 1, 2$ ), способствуют акты переходов мономеров роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ ,  $\gamma N^{-1}$  ( $\alpha, \beta, \gamma = A, B$ ) из кристаллического в жидкое состояние. Эти переходы зависят от частот отрыва указанных мономеров, которые в приближении ближайших соседей в зависимости от рассматриваемой конфигурации (знаков изломов в модели ПДЗ) можно записать в виде следующих уравнений, где  $\nu$  – частотный фактор, характеризующий колебания около положения равновесия частиц (мономеров роста в модели ПДЗ) в кристалле,  $K_B$  – постоянная Больцмана здесь принята за единицу:

$$\omega_{-\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) = \begin{cases} \text{vexp} \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(jk)} + \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{(jk)} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \omega_{1\alpha\beta}^{(jk)} & \text{при } K_i > 0, K_{i+1} < 0 \\ \text{vexp} \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(jk)} + 2 \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{(jk)} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \omega_{2\alpha\beta}^{(jk)} & \text{при } K_i > 0, K_{i+1} \geq 0 \\ & \text{либо } K_i \leq 0, K_{i+1} < 0 \\ \text{vexp} \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(jk)} + 3 \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{(jk)} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \omega_{3\alpha\beta}^{(jk)} & \text{при } K_i \leq 0, K_{i+1} \geq 0 \end{cases} \quad (1)$$

Здесь  $\omega_{-\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$  есть частота отрыва в столбике твердой фазы с индексом « $i$ » в схеме ПДЗ мономера роста  $\beta N^{-1}$ , принадлежащего подрешетке « $k$ », от мономера роста  $\alpha N^{-1}$ , принадлежащего подрешетке « $j$ », при условии нахождения самого  $i$ -го столбика в конфигурации, характеризуемой изломом высоты  $K_i$  слева и справа от него. Величина  $\varepsilon_{\alpha\beta}^{(jk)}$  и ей подобная  $\varepsilon_{\delta\beta}^{(jk)}$  означают взятые с обратным знаком энергии связи соседних мономеров  $\alpha N^{-1}$  (или  $\delta N^{-1}$ ),  $\beta N^{-1}$ , принадлежащих подрешеткам « $j$ » и « $k$ » соответственно в кристаллической фазе ( $\alpha, \beta, \delta = A, B; j, k = 1, 2$ ). Величины  $x_{\delta}^{(j)}$ , с помощью которых производится усреднение вышеупомянутых частот отрыва мономеров роста по энергиям связей ближайших соседей, означают вероятность замещения фиксированного узла  $j$ -той подрешетки кристалла мономером  $\delta N^{-1}$ . В случае простой кубической решетки и двухкомпонентной системы эти вероятности выражаются через параметр дальнего порядка « $\eta$ » согласно следующим формулам:

$$x_A^{(1)} = \frac{1}{2}(1+\eta), \quad x_B^{(1)} = \frac{1}{2}(1-\eta), \quad x_A^{(2)} = \frac{1}{2}(1-\eta), \quad x_B^{(2)} = \frac{1}{2}(1+\eta).$$

Учитывая, что в случае отрыва мономера роста от ближайшего соседнего в каждом из  $i$ -тых столбиков в модели ПДЗ оба они, а также ближайшие мономеры роста в двух других измерениях находятся в кристаллическом состоянии, которое отмечается индексом « $I$ », подобные частоты отрыва можно переписать в новом виде:

$$\omega_{-\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) = \begin{cases} \text{vexp} \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{11} + \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{11} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \omega_{1\alpha\beta}^{(jk)} & \text{при } K_i > 0, K_{i+1} < 0 \\ \text{vexp} \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{11} + 2 \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{11} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \omega_{2\alpha\beta}^{(jk)} & \text{при } K_i > 0, K_{i+1} \geq 0 \\ & \text{либо } K_i \leq 0, K_{i+1} < 0 \\ \text{vexp} \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{11} + 3 \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{11} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \omega_{3\alpha\beta}^{(jk)} & \text{при } K_i \leq 0, K_{i+1} \geq 0 \end{cases} \quad (2)$$

Здесь  $\varepsilon_{\alpha\beta}^{11}$ ,  $\varepsilon_{\delta\beta}^{11}$  означают взятые с обратным знаком энергии связи двух ближайших мономеров роста  $\alpha N^{-1}$  и  $\beta N^{-1}$  (соответственно  $\delta N^{-1}$  и  $\beta N^{-1}$ ), находящихся в кристаллическом состоянии. Индексы, фиксирующие

принадлежность взаимодействующих мономеров роста соседних подрешеток при этом опущены.

Следующим важным шагом при исследовании структуры ПДЗ и связанных с ней процессов разупорядочения двухкомпонентных кристаллов с простой кубической решеткой в области температур, меньших  $T_c$  (температуры Кюри), является учет зависимости частот присоединения мономера роста от энергий их связи в первом приближении и от температуры границы раздела системы двухкомпонентный расплав-кристалл.

Полагая, что для энергии связи в металлических двухкомпонентных системах двух соседних мономеров роста в модели ПДЗ при условии, что, по крайней мере, один из них находится в жидкой фазе (расплаве), справедливы следующие соотношения

$$\varepsilon_{AA}^{12} = \varepsilon_{AB}^{12} = \varepsilon_{AA}^{22} = \varepsilon_{AB}^{22} = \varepsilon_{BB}^{12} = \varepsilon_{BA}^{12} = \varepsilon_{BB}^{22} = \varepsilon_{BA}^{22}$$

для частот присоединения мономеров роста из расплава к кристаллу  $\omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1})$ ,  $\omega_{+\beta\gamma}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$  можно записать следующие формулы:

$$\begin{aligned} \omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1}) &= \omega_{+1\alpha\beta}^{(jk)} = v_+ \exp \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(jk)} + \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{(jk)} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \\ &= v_+ \exp \left[ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^{12} + \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\beta}^{12} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] \text{ при } (K_i - N)^{-1} < 0, K_{i+1} \leq 0 \\ \omega_{+\beta\gamma}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) &= \omega_{+1\beta\gamma}^{(jk)} = v_+ \exp \left[ -\frac{\varepsilon_{\beta\gamma}^{(jk)} + \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\gamma}^{(jk)} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] = \\ &= v_+ \exp \left[ -\frac{\varepsilon_{\beta\gamma}^{12} + \sum_{\delta} \varepsilon_{\delta\gamma}^{12} x_{\delta}^{(j)}}{T} \right] \text{ при } K_i < 0, K_{i+1} \leq 0 \\ \omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1}) &= \omega_{+\beta\gamma}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) \\ &= v_+ q_2 \text{ при } (K_i - N)^{-1} < 0, K_i < 0, K_{i+1} \leq 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $v_+$  – частотный фактор, характеризующий степень колебаний около положений равновесия мономеров роста в двухкомпонентных металлических расплавах,  $q_2 = \exp \left[ -\frac{2\varepsilon_{AA}^{12}}{T} \right]$ ,  $\varepsilon_{AA}^{12}$  – взятая с обратным знаком энергия взаимодействия двух одинаковых частиц А-А (мономеров роста в модели ПДЗ), находящихся одна в кристалле (верхний индекс 1), а другая в расплаве (верхний индекс 2).

Если ввести величину  $q_1 = \exp \left[ -\frac{\varepsilon_{AA}^{11}}{T} \right] = \exp \left[ -\frac{\varepsilon_{BB}^{11}}{T} \right]$ , связанную с энергиями связи двух ближайших мономеров роста одного сорта в кристаллической фазе, то, используя соотношения между величинами  $\varepsilon_{AA}^{12} = \varepsilon_{AB}^{12} = \varepsilon_{BB}^{12} = \varepsilon_{BA}^{12}$  и  $\varepsilon_{AA}^{11} = \varepsilon_{BB}^{11}$  в виде  $\varepsilon_{AA}^{12} = \varepsilon_{AB}^{12} = n\varepsilon_{AA}^{11} = n\varepsilon_{BB}^{11}$ , где  $n$  –

обычно меньшее единицы число, например  $n = 1/2 = 1/3$ , можно получить следующее соотношение параметров  $q_1$  и  $q_2$ :

$$q_1^n = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{AB}^{12}}{T}\right] = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{BA}^{12}}{T}\right] = q_2^{1/2}, \text{ то есть } q_2 = q_1^{2n} \quad (4)$$

В частности, для металлических двухкомпонентных расплавов, для которых  $n = 1/2$  имеем равенство параметров  $q_1 = q_2$ .

Для описания структуры ПДЗ, следует ввести функцию распределения мономеров роста по моноатомной толщине столбцам кристаллической фазы, заключенным между изломами определенной величины слева и справа от них. Например,  $X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$ , есть вероятность обнаружить столбцы кристаллической фазы в модели ПДЗ, оканчивающихся сверху мономерами роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ , принадлежащими подрешеткам « $j$ » и « $k$ » соответственно в конфигурации с изломами  $K_i$  и  $K_{i+1}$  слева и справа от него. Функция  $X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i)$ , есть вероятность обнаружить столбик, оканчивающийся мономерами роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ , принадлежащими соответственно подрешеткам « $j$ » и « $k$ », у излома высоты  $K_i$  ( $i=1, \dots, n_0$ ).

Фундаментальные вероятности найти столбик кристаллической фазы, оканчивающийся мономерами роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ , принадлежащими узлам подрешеток « $j$ » и « $k$ » соответственно, и находящийся у излома высоты  $K_i$ , т.е.  $X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i)$  ( $\alpha, \beta = A, B; j, k = 1, 2; i = 1, \dots, n_0$ ) определены в классе функций вида:

$$X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i) = \begin{cases} X_{\alpha\beta}^{(jk)}(0)\lambda^{K_i} & \text{при } K_i \geq 0 \\ X_{\alpha\beta}^{(jk)}(0)\lambda^{|K_i|} & \text{при } K_i < 0 \end{cases}$$

где параметр «шероховатости» границы раздела фаз  $\lambda$  заключен в пределах  $0 < \lambda \leq 1$ ,  $X_{\alpha\beta}^{(jk)}(0)$  – функция, определяющая вероятность найти в модели ПДЗ столбик кристаллической фазы, оканчивающийся мономерами роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ , принадлежащими подрешеткам « $j$ » и « $k$ » соответственно, у излома нулевой высоты.

С учетом приведенных соотношений для частот отрыва и присоединения мономеров роста, определения для параметра «шероховатости»  $\lambda$  может быть получена следующая система шести трансцендентных независимых уравнений, отвечающая шести независимым величинам  $X_{\alpha\beta}^{(12)}(0)$ ,  $\alpha, \beta = A, B; \lambda$  и  $\eta$

$$A_i(v) \frac{dX_A^{(1)}(K_i)}{dt} = R\lambda^{N-1} \left[ \lambda^{N-1} (1 - \lambda^{N-1}) - 2(1 - \lambda^{A_i}) \sum_{\alpha} X_{\alpha B}^{(12)}(0) \right] +$$



$$\begin{aligned}
& + (1 - \lambda^{N-1}) \left[ \sum_{\gamma} S_{3A\gamma}^{(12)} X_{A\gamma}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} \sum_{\alpha} S_{3\alpha B}^{(12)} X_{\alpha B}^{(12)}(0) \right] + \\
& + (\lambda^{N-1} - \lambda^{\Delta_i}) \left[ \sum_{\gamma} S_{2A\gamma}^{(12)} X_{A\gamma}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} \sum_{\alpha} S_{2\alpha B}^{(12)} X_{\alpha B}^{(12)}(0) \right] = 0 \\
A_i(\nu) \frac{dX_B^{(1)}(K_i)}{dt} & = R \lambda^{N-1} \left[ \lambda^{N-1} (1 - \lambda^{N-1}) - 2(1 - \lambda^{\Delta_i}) \sum_{\alpha} X_{\alpha A}^{(12)}(0) \right] + \\
& + (1 - \lambda^{N-1}) \left[ \sum_{\gamma} S_{3B\gamma}^{(12)} X_{B\gamma}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} \sum_{\alpha} S_{3\alpha A}^{(12)} X_{\alpha A}^{(12)}(0) \right] + \\
& + (\lambda^{N-1} - \lambda^{\Delta_i}) \left[ \sum_{\gamma} S_{2B\gamma}^{(12)} X_{B\gamma}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} \sum_{\alpha} S_{2\alpha A}^{(12)} X_{\alpha A}^{(12)}(0) \right] = 0
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned}
C_i(\nu) \frac{dX_{AA}^{(12)}(K_i)}{dt} & = R \lambda^{N-1} \left[ \lambda^{N-1} \sum_{\delta} X_{A\delta}^{(12)}(0) - 2X_{AA}^{(12)}(0) \right] + \\
& + \frac{X_{AA}^{(12)}(0)}{\sum_{\delta} X_{\delta A}^{(12)}(0)} \sum_{\gamma} S_{2\gamma A}^{(12)} X_{\gamma A}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} S_{2AA}^{(12)} X_{AA}^{(12)}(0) = 0 \\
C_i(\nu) \frac{dX_{BB}^{(12)}(K_i)}{dt} & = R \lambda^{N-1} \left[ \lambda^{N-1} \sum_{\delta} X_{B\delta}^{(12)}(0) - 2X_{BB}^{(12)}(0) \right] + \\
& + \frac{X_{BB}^{(12)}(0)}{\sum_{\delta} X_{\delta B}^{(12)}(0)} \sum_{\gamma} S_{2\gamma B}^{(12)} X_{\gamma B}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} S_{2BB}^{(12)} X_{BB}^{(12)}(0) = 0 \\
C_i(\nu) \frac{dX_{AB}^{(12)}(K_i)}{dt} & = R \lambda^{N-1} \left[ \lambda^{N-1} \sum_{\delta} X_{A\delta}^{(12)}(0) - 2X_{AB}^{(12)}(0) \right] + \\
& + \frac{X_{AB}^{(12)}(0)}{\sum_{\delta} X_{\delta B}^{(12)}(0)} \sum_{\gamma} S_{2\gamma B}^{(12)} X_{\gamma B}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} S_{2AB}^{(12)} X_{AB}^{(12)}(0) = 0 \\
C_i(\nu) \frac{dX_{BA}^{(12)}(K_i)}{dt} & = R \lambda^{N-1} \left[ \lambda^{N-1} \sum_{\delta} X_{B\delta}^{(12)}(0) - 2X_{BA}^{(12)}(0) \right] + \\
& + \frac{X_{BA}^{(12)}(0)}{\sum_{\delta} X_{\delta A}^{(12)}(0)} \sum_{\gamma} S_{2\gamma A}^{(12)} X_{\gamma A}^{(12)}(0) - \lambda^{N-1} S_{2BA}^{(12)} X_{BA}^{(12)}(0) = 0
\end{aligned}$$

Здесь введены следующие величины:

$$\begin{aligned}
A_i(\nu) & = \nu^{-1} (1 - \lambda^{\Delta_i}) \lambda^{-|K_i+N-1|}, \quad C_i(\nu) = \nu^{-1} \lambda^{-|K_i+N-1|}, \\
\Delta_i & = \langle C_{i-1} \rangle - \langle C_{i+1} \rangle, \quad R = \frac{\nu_+}{\nu} q_2 = \frac{\nu_+}{\nu} q_1^{2n}, \quad S_{p\alpha\beta}^{(12)} = \frac{\omega_{p\alpha\beta}^{(12)}}{\nu} \quad (p=2,3).
\end{aligned}$$

Отличие представленных трансцендентных уравнений (5) от их аналогов, полученных в более ранних работах, состоит в появлении зависимости функций  $X_{\alpha\beta}^{(12)}(0)[q_1, q_2, \eta]$ ,  $\lambda(q_1, q_2, \eta)$ ,  $\eta(q_1, q_2)$  от новых параметров  $q_1, q_2, R$ , которые в свою очередь, определены через энергии связей ближайших соседних мономеров роста разных агрегатных состояний и зависят от температуры кристаллизующейся системы двухкомпонентный расплав-кристалл.

Условия равенства количеств атомов в обоих состояниях двух сортов «**A**» и «**B**» и чисел узлов обеих подрешеток, характеризующие кристаллизующуюся двухкомпонентную систему расплав-кристалл, приводят к выводу об инвариантности коэффициентов  $S_{p\alpha\beta}^{(12)} = inv$  ( $p = 2, 3$ ) и функций  $X_{\alpha\beta}^{(12)}(0)$  относительно одновременных преобразований  $A \rightleftharpoons B, 1 \rightleftharpoons 2$  ( $X_{\alpha\beta}^{(12)}(0) = inv$

при  $\alpha, \beta = A, B$ ). Это важное обстоятельство играет существенную роль при исследовании процессов разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы в области температур ниже температуры упорядочения Кюри  $T_c$ .

В главе 3 приведены анализ и его результаты процессов разупорядочения в двухкомпонентных металлических сплавах с простой кубической симметрией, формирующихся из 50% металлических двухкомпонентных расплавов в области конечных переохлаждений системы расплав-кристалл. Представленный анализ процессов разупорядочения (в смысле параметра дальнего порядка) в двухкомпонентных кристаллах осуществлен в приближении Брэгга-Вильямса  $\eta \sim \sqrt{T - T_k}$ , где  $T, T_k$  – текущая и полного разупорядочения температуры соответственно. Отмечено, что в этом приближении параметр дальнего порядка обращается в нуль непрерывным образом в полном соответствии с классическим термодинамическим кинетическим разупорядочением Брэгга-Вильямса. Особо указаны и определены особенности кинетики роста двухкомпонентных металлических кристаллов в области температуры разупорядочения в модели переходной двухфазной зоны (см. [4, 5, 6]).

Рассмотрим область температуры разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической решеткой, структура которой в модели ПДЗ пространства концентраций описывается системой стационарных трансцендентных уравнений. В этой области введем следующие параметры малости  $\Delta X_i$  ( $i = 1, \dots, 5$ ), характеризующие отклонения неизвестных функций  $X_{\alpha\beta}^{(12)}(\mathbf{0})[q_1, \eta](\alpha, \beta = A, B)$ ,  $\lambda(q_1, \eta)$  от их значений  $X_{\alpha\beta}^{[0](12)}(\mathbf{0})$ ,  $\lambda^{[0]}$ , определенных для полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы:

$$\begin{aligned} \Delta x_1 &= X_{AA}^{(12)}(\mathbf{0}) - X_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}), \Delta x_2 = X_{AB}^{(12)}(\mathbf{0}) - X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0}), \\ \Delta x_3 &= X_{BA}^{(12)}(\mathbf{0}) - X_{BA}^{[0](12)}(\mathbf{0}), \Delta x_4 = X_{BB}^{(12)}(\mathbf{0}) - X_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}), \Delta x_5 = \lambda^{[0]} - \lambda. \end{aligned}$$

Линеаризация системы независимых трансцендентных уравнений (5) относительно малых параметров  $\Delta x_i \ll 1$  ( $i = 1, \dots, 5$ ) и  $\beta_0$ , где  $|\beta_0| = |(m-1)\ell n q_1| \eta \ll 1$  приводит к следующей системе шести однородных линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} \alpha_{11}\Delta x_1 + \alpha_{12}\Delta x_2 &+ \alpha_{14}\Delta x_4 + \alpha_{15}\Delta x_5 - \alpha_{16}\beta_0 = 0 \\ \alpha_{14}\Delta x_1 &+ \alpha_{12}\Delta x_3 + \alpha_{11}\Delta x_4 + \alpha_{15}\Delta x_5 + \alpha_{16}\beta_0 = 0 \\ \alpha_{31}\Delta x_1 + \alpha_{32}\Delta x_2 + \alpha_{33}\Delta x_3 &+ \alpha_{35}\Delta x_5 + \alpha_{36}\beta_0 = 0 \\ &\alpha_{33}\Delta x_2 + \alpha_{32}\Delta x_3 + \alpha_{31}\Delta x_4 + \alpha_{35}\Delta x_5 - \alpha_{36}\beta_0 = 0 \\ \alpha_{32}\Delta x_1 + \alpha_{52}\Delta x_2 &+ \alpha_{54}\Delta x_4 + \alpha_{55}\Delta x_5 + \alpha_{56}\beta_0 = 0 \\ \alpha_{54}\Delta x_1 &+ \alpha_{52}\Delta x_3 + \alpha_{32}\Delta x_4 + \alpha_{55}\Delta x_5 - \alpha_{56}\beta_0 = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где коэффициенты  $\alpha_{ij}$ , фигурирующие в уравнениях системы (7), описываются следующими выражениями:

$$\begin{aligned}
\alpha_{11} &= (\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}}) \mathbf{S}_{3AA}^{[0](12)} + (\lambda^{[0]N^{-1}} - \lambda^{[0]\Delta_i}) \mathbf{S}_{2AA}^{[0](12)}; \\
\alpha_{12} &= (\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}})^2 \mathbf{S}_{3AB}^{[0](12)} + (\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}})(\lambda^{[0]N^{-1}} - \lambda^{[0]\Delta_i}) - \\
&\quad - 2R\lambda^{[0]N^{-1}}(\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}}); \\
\alpha_{14} &= -2R\lambda^{[0]N^{-1}}(\mathbf{1} - \lambda^{[0]\Delta_i}) - \lambda^{[0]N^{-1}}(\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}}) \mathbf{S}_{3AA}^{[0](12)} - \\
&\quad - \lambda^{[0]N^{-1}}(\lambda^{[0]N^{-1}} - \lambda^{[0]\Delta_i}) \mathbf{S}_{2AA}^{[0](12)}; \\
\alpha_{15} &= -RN^{-1}\lambda^{[0]2N^{-1}-1} [2(\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}}) - \lambda^{[0]N^{-1}}] - \\
&\quad - 2R\lambda^{[0]N^{-1}} [\lambda^{[0]\Delta_i}(\Delta_i + N^{-1}) - N^{-1}] \sum_{\gamma} \mathbf{X}_{A\gamma}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + \\
&\quad + 2N^{-1}\lambda^{[0]N^{-1}-1}(\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}}) \sum_{\gamma} \mathbf{S}_{3A\gamma}^{[0](12)} \mathbf{X}_{A\gamma}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + \\
&\quad + N^{-1}\lambda^{[0]N^{-1}-1}(\lambda^{[0]N^{-1}} - \lambda^{[0]\Delta_i}) - \\
&\quad - (\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}})(N^{-1}\lambda^{[0]N^{-1}-1} - \Delta_i\lambda^{[0]\Delta_i-1}) \sum_{\gamma} \mathbf{S}_{2A\gamma}^{[0](12)} \mathbf{X}_{A\gamma}^{[0](12)}(\mathbf{0}); \\
\alpha_{16} &= \frac{3}{2}(\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}}) \mathbf{S}_{3AA}^{[0](12)} \mathbf{X}_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + \\
&\quad + \frac{3}{2}(\mathbf{1} - \lambda^{[0]N^{-1}}) \lambda^{[0]N^{-1}} \sum_{\gamma} \mathbf{S}_{3A\gamma}^{[0](12)} \mathbf{X}_{A\gamma}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + \\
&\quad + (\lambda^{[0]N^{-1}} - \lambda^{[0]\Delta_i}) \mathbf{S}_{2AA}^{[0](12)} \mathbf{X}_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}) - \\
&\quad - (\lambda^{[0]N^{-1}} - \lambda^{[0]\Delta_i}) \mathbf{S}_{2AB}^{[0](12)} \mathbf{X}_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + \\
&\quad + (\lambda^{[0]N^{-1}} - \lambda^{[0]\Delta_i}) \lambda^{[0]N^{-1}} \sum_{\gamma} \mathbf{S}_{2A\gamma}^{[0](12)} \mathbf{X}_{A\gamma}^{[0](12)}; \\
\alpha_{31} &= R\lambda^{[0]N^{-1}}(\lambda^{[0]N^{-1}} - 2) - \lambda^{[0]N^{-1}} \mathbf{S}_{2AA}^{[0](12)} + \\
&\quad + \frac{\mathbf{S}_{2AA}^{[0](12)} \sum_{\delta} \mathbf{X}_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + \mathbf{X}_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0}) \sum_{\delta} \mathbf{S}_{2A\delta}^{[0](12)} \mathbf{X}_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})}{\left(\sum_{\delta} \mathbf{X}_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})\right)^2}; \\
\alpha_{32} &= R\lambda^{[0]N^{-1}}; \\
\alpha_{33} &= \left(\frac{\mathbf{X}_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0})}{\sum_{\delta} \mathbf{X}_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})}\right)^2 \left(\mathbf{S}_{2AB}^{[0](12)} - \mathbf{S}_{2AA}^{[0](12)}\right); \\
\alpha_{35} &= 2RN^{-1}\lambda^{[0]N^{-1}-1} \left(\mathbf{X}_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}) - \lambda^{[0]N^{-1}} \sum_{\delta} \mathbf{X}_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})\right) +
\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
& + N^{-1} \lambda^{[0]N^{-1}-1} S_{2AA}^{[0](12)} X_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}); \\
\alpha_{36} = & X_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}) \left[ \lambda^{[0]N^{-1}} S_{2AA}^{[0](12)} - \frac{\sum_{\gamma} S_{2A\gamma}^{[0](12)} X_{A\gamma}^{[0](12)}(\mathbf{0})}{\sum_{\delta} X_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})} \right]; \\
\alpha_{52} = & R \lambda^{[0]N^{-1}} (\lambda^{[0]N^{-1}} - 2) - \lambda^{[0]N^{-1}} S_{2AB}^{[0](12)} + \\
& + \frac{S_{2AB}^{[0](12)} X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0}) \sum_{\delta} X_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + X_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}) \sum_{\delta} S_{2A\gamma}^{[0](12)} X_{A\gamma}^{[0](12)}(\mathbf{0})}{\left( \sum_{\delta} X_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0}) \right)^2}; \\
\alpha_{54} = & \left( \frac{X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0})}{\sum_{\delta} X_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})} \right)^2 \left( S_{2AA}^{[0](12)} - S_{2AB}^{[0](12)} \right); \\
\alpha_{55} = & 2RN^{-1} \lambda^{[0]N^{-1}-1} \left( X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0}) - \lambda^{[0]N^{-1}} \sum_{\delta} X_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0}) \right) + \\
& + N^{-1} \lambda^{[0]N^{-1}-1} S_{2AB}^{[0](12)} X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0}); \\
\alpha_{56} = & \frac{X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0})}{\sum_{\delta} X_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})} (1 - \lambda^{[0]N^{-1}}) S_{2AB}^{[0](12)} X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0}) + \\
& + \frac{X_{AB}^{[0](12)}(\mathbf{0})}{\sum_{\delta} X_{A\delta}^{[0](12)}(\mathbf{0})} X_{AA}^{[0](12)}(\mathbf{0}) \left( S_{2AA}^{[0](12)} - \lambda^{[0]N^{-1}} S_{2AB}^{[0](12)} \right).
\end{aligned}$$

В рассмотренных приближениях Брэгга-Вильямса после вычитания 2-го уравнения из 1-го системы и операции деления разности на  $|(m-1)\ln q_1|$  можно получить следующее уравнение 3-ей степени относительно параметра  $\eta$ :

$$A_1 \eta + K_1 \eta^3 = 0$$

$$\text{где } A_1 = (\alpha_{11} - \alpha_{14}) a_1^{\Pi} + \alpha_{12} a_2^{\Pi} - \alpha_{16}, \quad K_1 = (\alpha_{11} - \alpha_{14}) c_1^{\Pi} + \alpha_{12} c_2^{\Pi}$$

$$a_1^{\Pi} \equiv \frac{a_1}{|(m-1)\ln q_1|}, \quad a_2^{\Pi} \equiv \frac{a_2}{|(m-1)\ln q_1|},$$

$$c_1^{\Pi} \equiv \frac{c_1}{|(m-1)\ln q_1|}, \quad c_2^{\Pi} \equiv \frac{c_2}{|(m-1)\ln q_1|}.$$

где  $c_2^{\Pi} < 0$ , что согласуется с ранее известными исследованиями разупорядочения в приближении Брэгга-Вильямса.

Из уравнения 3-ей степени получаем нетривиальные решения для параметра дальнего порядка, по которому можно в квази-приближении Брэгга-Вильямса оценить закон обращения параметра дальнего порядка в нуль при достижении критической температуры кристаллизации **50%** двухкомпонентных металлических расплавов в модели переходной двухфазной зоны:

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{c_2^{\Pi}}} \sqrt{\frac{\alpha_{16}(\alpha_{32} - \alpha_{54}) + \alpha_{56}(\alpha_{11} - \alpha_{14})}{\alpha_{12}(\alpha_{32} - \alpha_{54}) + \alpha_{52}(\alpha_{11} - \alpha_{14})} - \frac{\alpha_{16}}{\alpha_{11} - \alpha_{12} - \alpha_{14}}}$$

Полученное выражение для определения закона процесса разупорядочения двухкомпонентных металлических кристаллов стехиометрического состава с простой кубической решеткой зависит от некоторой константы

$$c^n = \frac{\alpha_{12}\alpha_{16}(\alpha_{32} - \alpha_{52} - \alpha_{54}) - (\alpha_{11} - \alpha_{12} - \alpha_{14})(\alpha_{12}\alpha_{56} + 2\alpha_{16}\alpha_{52})}{(\alpha_{11} - \alpha_{12} - \alpha_{14})[\alpha_{16}(\alpha_{32} - \alpha_{54}) + \alpha_{56}(\alpha_{11} - \alpha_{14})] - \alpha_{16}[\alpha_{12}(\alpha_{32} - \alpha_{54}) - \alpha_{52}(\alpha_{11} - \alpha_{14})]}$$

и коэффициентов  $\alpha_{ij}$ , фигурирующих в линеаризованной системе однородных алгебраических уравнений.

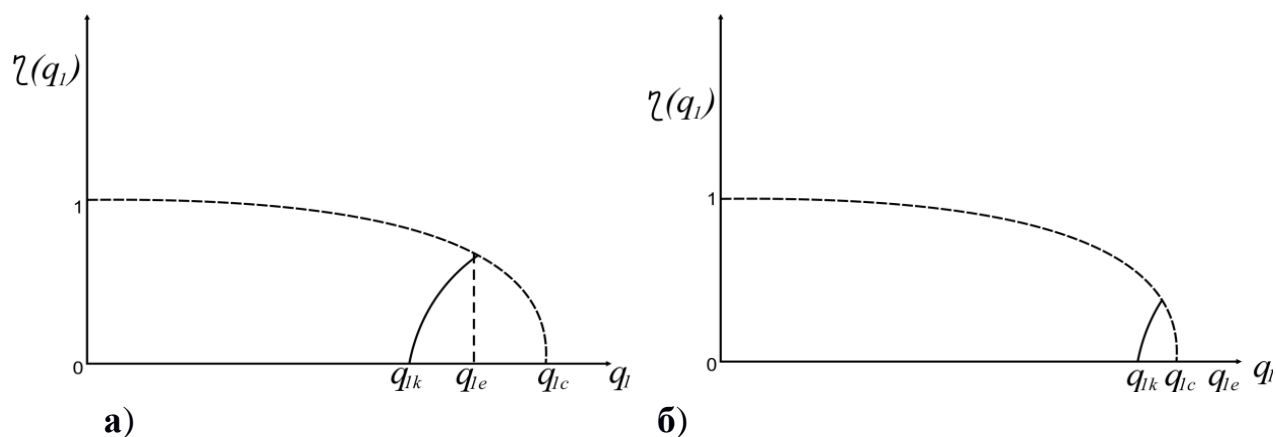
Если для жидкого металлического двухкомпонентного расплава взять расстояние между атомами равным  $a = 10^{-9}$  м, то при характерном коэффициенте диффузии для жидких расплавов  $D = 10^{-10} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$ , то оценочно частотный фактор  $\nu_+$ , связанный с переносом частицы в расплаве из одного «оседлого» состояния в другое оказывается равным  $\nu_+ = 3 \cdot 10^8 \text{с}^{-1}$ . При частоте колебаний частиц около положения равновесия в кристалле равной  $\nu = 10^{13} \text{с}^{-1}$  оценка критического параметра  $q_{1k}$ , связанного с критической температурой разупорядочения в модели ПДЗ оказывается равна величине  $q_{1k} = (6 \cdot 10^{-5})^{\frac{1}{2(m-n)+1}}$ . При характерных для металлических расплавов числах  $m = 2, n = 1/2$ , получаем, что  $q_{1k} = 0,08$ . Сравнение параметров  $q_{1k} = 0,08$  и равновесного  $q_{1e} = 0,11$  показывает, что температура полного разупорядочения меньше температуры кинетического равновесия системы двухкомпонентный металлический расплав-кристалл и, следовательно, процесс разупорядочения происходит в двухкомпонентной кристаллической фазе.

В работах [14, 15] при кристаллизации 50% двухкомпонентного расплава  $Ag - Au$  показаны с большой степенью достоверности признаки почти полного разупорядочения кристаллического сплава  $Ag - Au$ , имеющего простую кубическую элементарную ячейку с температурой линии ликвидус  $T_p = 1308$  К (при данной концентрации 50% обеих компонент) при нормальных переохлаждениях системы двухкомпонентный расплав-кристалл. В нашей работе 2) показано, что процесс разупорядочения в двухкомпонентном металлическом кристалле  $AB$  начинается при достижении параметром  $q = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{AA}^{11}}{T}\right]$  величины  $q_k = 0,08 = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{AA}^{11}}{T_k}\right]$ . Если принять, что величина энергии взаимодействия двух одинаковых атомов в кристалле в приближении ближайших соседей составляет  $\varepsilon_{AA} = 0,28$  эВ, то значение критической температуры разупорядочения в кристаллической двухкомпонентной фазе начинается при значении  $T_k = \frac{\varepsilon_{AA}}{K_B \ln q_{1k}} = 1280$  К. Соответствующее этой критической температуре величина переохлаждения системы 50%

двухкомпонентный металлический расплав-кристалл оказывается равной  $\Delta T_k = 28$  К.

Данное обстоятельство экспериментально подтверждает возможность, предсказанную теорией процесса порядок-беспорядок в металлических кристаллических двухкомпонентных фазах при температурах ниже температуры плавления соответствующих двухкомпонентных систем и соответствующей температуры разупорядочения Кюри.

Обращение параметра дальнего порядка  $\eta(q_1)$  в нуль в рассмотренном приближении **50%** двухкомпонентных металлических расплавов-кристалл в кристаллической фазе происходит согласно термодинамическому закону Брэгга-Вильямса, графическая иллюстрация которого представлена на рис. 5. Сплошная кинетическая кривая описывает стремление параметра дальнего порядка к нулю непрерывным образом. На рис. 5 показано взаимное расположение параметров  $q_{1k}$ ,  $q_{1e}$  и  $q_{1c}$ , связанных соответственно с температурами разупорядочения  $T_k$ , кинетического равновесия  $T_e$  и температурой Кюри  $T_c$  согласно формулам:  $q_{1k} = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{AA}^{11}}{T_k}\right]$ ,  $q_{1e} = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{AA}^{11}}{T_e}\right]$ ,  $q_{1c} = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{AA}^{11}}{T_c}\right]$ . Слева от критической точки  $q_{1k}$ , т. е. при температурах  $T < T_k$ , предполагается образование полностью разупорядоченной кристаллической двухкомпонентной металлической фазы.



**Рис.5** Зависимости параметра дальнего порядка от параметра  $q_1 = \exp\left[-\frac{\varepsilon_{AA}^{11}}{T}\right]$  для случаев а)  $q_{1k} < q_{1e} < q_{1c}$  и б)  $q_{1k} < q_{1c} < q_{1e}$ . Штриховые линии – классические термодинамические зависимости  $\eta(q_1) \sim \eta(T)$ , сплошные линии – кинетические кривые, описывающие разупорядочение согласно закону  $\sqrt{T - T_k}$  Брэгга-Вильямса.

На рис. 5 а) и б) штриховая линия, описывающая классическую термодинамическую кривую  $\eta(T)$ , пересекает ось абсцисс в точке  $q_{1c}$ . В случае, представленном на рис. 5 а) кинетическая кривая пересекает классическую термодинамическую кривую  $\eta(q_1)$  в точке  $q_{1e}$ , что соответствует образованию при температуре кинетического равновесия  $T_e$

кристаллической двухкомпонентной металлической фазы. Если температура разупорядочения двухкомпонентной металлической кристаллической фазы  $T_k$  близка к температуре Кюри  $T_c$ , то уже при незначительных переохлаждениях системы **50%** двухкомпонентный металлический расплав-кристалл следует ожидать образование полностью разупорядоченного двухкомпонентного кристалла.

В рассмотренном выше случае процесса кристаллизации **50%**-ных двухкомпонентных металлических расплавов в модели переходной двухфазной зоны для кристаллов с простой кубической решеткой установлено, что явление полного разупорядочения двухкомпонентной металлической кристаллической фазы при учете зависимости частоты присоединения мономеров роста от температуры кристаллизации и от конфигурации ПДЗ происходит в соответствии с классическим термодинамическим переходом Брэгга-Вильямса, когда параметр дальнего порядка стремится к нулю непрерывным образом согласно закону  $\eta = \sqrt{T - T_k}$ . Отмечено, что температура полного разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы в указанных выше приближениях находится в области, удаленной от температуры кинетического равновесия системы двухкомпонентный расплав-кристалл, а следовательно и температуры Кюри, когда согласно представлениям классической термодинамики должна расти полностью упорядоченная кристаллическая фаза. Этот процесс разупорядочения имеет особенности кинетического перехода и сопровождается скачком величины средней скорости кристаллизации переходной двухфазной зоны, отделяющей собой двухкомпонентный расплав от кристалла. Кинетический скачок в точке разупорядочения пропорционален квадрату параметра дальнего порядка  $\eta^2$ . Все изложенные в настоящей работе основные физические выводы находятся в полном соответствии с результатами, опубликованными ранее (см. [7 – 9]).

**В заключении** представлены основные результаты и выводы диссертации:

## **ВЫВОДЫ**

1. Установлено, что в модели переходной двухфазной зоны в виртуальном пространстве концентраций мономеров роста, заменяющих собой реальные частицы поверхности раздела расплав-кристалл, процесс разупорядочения двухкомпонентной кристаллической матрицы сопровождается особенностью в самой кинетике кристаллизации ПДЗ, которая заключается в наличии угловой особенности средней скорости кристаллизации в точке разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы.
2. Показано, что указанная выше угловая особенность представляет собой скачок на конечную величину средней скорости роста кристаллической фазы

из **50%** двухкомпонентного металлического расплава, пропорциональную квадрату параметра дальнего порядка  $\eta^2$ .

3. Показано, что в силу самого существования переходной двухфазной области конечных размеров и состоящей из мономеров роста различных агрегатных состояний (фаз) и особенности кинетики ее эволюции, рассмотренное выше бездиффузионное превращение в системе расплав-кристалл можно отнести к категории кинетических фазовых эффектов, обладающих одним присущим фазовым переходам **2-го** рода свойством: параметр дальнего порядка стремится к нулю непрерывным образом, хотя термодинамические потенциалы в точке разупорядочения не испытывают разрывов, что характерно для любого фазового перехода **2-го** рода.
4. Установлено, что рассмотренный выше процесс кристаллизации **50%** двухкомпонентных металлических расплавов при учете зависимости частот обмена мономерами роста между расплавом и кристаллом в обоих направлениях от структуры и состава виртуальной переходной двухфазной области, а также от температуры кристаллизации подтвердил известные ранее в более простых моделях кристаллизации законы разупорядочения двухкомпонентных металлических кристаллов при температурах ниже температуры Кюри и кинетического равновесия и угловой особенности кинетики реализации процесса роста кристаллической фазы.
5. Показано, что движущей силой процесса кристаллизации (в том числе скорости эволюции переходной двухфазной зоны) является переохлаждение двухкомпонентной металлической системы. В рассмотренных условиях кристаллизации температура полного разупорядочения сместилась в область более низких температур (больших переохлаждений системы расплав–кристалл).
6. Установлено, что учет зависимости частоты обмена мономерами роста между расплавом и кристаллом в обоих направлениях от структуры и состава виртуальной переходной двухфазной области, а также от температуры кристаллизации сказывается на положении точки разупорядочения кристаллической двухкомпонентной системы. Требуется большее переохлаждение двухкомпонентной металлической системы для реализации процесса порядок-беспорядок. Отмечено, что в указанных приближениях разупорядочения Брэгга-Вильямса топология ПДЗ (ее ступенчатая форма) не оказывает влияния на закон разупорядочения.
7. Использованы элементы математической теории результатов для определения температуры разупорядочения и характера закона разупорядочения, что позволило упростить получение закона разупорядочения кристаллической фазы.



В конце диссертационной работы представлены необходимые математические приложения приводимых результатов исследования, сделаны общие выводы и приведен необходимый список литературы.

**Цитируемая литература:**

- [1] Чернов А.А. Кинетические фазовые переходы /А.А.Чернов. //ЖЭТФ, т. 53, – №12. – 1967. – с. 2090.
- [2] Чистяков Ю.Д. Некоторые особенности теории роста кристаллов по Косселю-Странскому, связанные с наличием вакансий в его объеме /Ю.Д. Чистяков, Ю.А. Байков. //Сб. научных трудов по проблемам микроэлектроники, Вып. IV (физ.-хим. серия). Эпитаксия. – М.: МИЭТ, – 1969. – с. 73.
- [3] Байков Ю.А. Теоретическое исследование кинетического фазового перехода. /Ю.А. Байков. //Сб. научных трудов по проблемам микроэлектроники, Вып. IV (физ.-хим. серия). Эпитаксия. – М.: МИЭТ, – 1969. – с. 82.
- [4] Саркисов П.Д. Математическое моделирование кристаллизации одно- и двухкомпонентных металлических расплавов. /П.Д. Саркисов, Ю.А. Байков, В.П. Мешалкин. – Москва: Физматлит, 2003. – 378 с.
- [5] Sarkisov P.D. The order-disorder process in crystals growing from the binary vapour-gas mixtures and metallic melts /P.D. Sarkisov, V.P. Meshalkin, Yu. A. Baikov. //Collection of Works. The Optimization of Composition, Structure and Properties of Metals, Oxides, Composites, Nano – and Amorphous Materials, Russia-Israel Conference, Moscow – Yekaterinburg, –2002. – p. 184.
- [6] Саркисов П.Д. Процессы разупорядочения в кристаллах при кристаллизации двойных металлических расплавов /П.Д. Саркисов, Ю.А. Байков, В.П. Мешалкин. //ДАН РФ, т. 390, – № 6, – 2003, – с. 763.
- [7] Baikov Yu. A. On the analytical theory of kinetic order-disorder phase transition in binary crystals. Influence of topological restrictions /Yu. A. Baikov, Yu. V. Zelenev, W. Haubenreisser, H. Pfeiffer. //Phys. stat. Solidi (a), 1980, – Bd. 61. – № 2. – s. 435.
- [8] Chistyakov Yu. D. The order-disorder transformation at supercooled melt/crystal transition region of binary melts (I) the master equation /Yu. D. Chistyakov, Yu. A. Baikov, H.G. Schneider, V. Ruth. //Crystal Research and Technology, v. 20, – № 8. – 1985. – p. 1007.
- [9] Chistyakov Yu. D. The order-disorder transformation at supercooled melt/crystal transition regions of binary melts (II). The steady-state solution /Yu. D. Chistyakov, Yu. A. Baikov, H.G. Schneider, V. Ruth. //Crystal Research and Technology, v. 20, – № 9. – 1985. – p. 1149.

- [10] Cahn J.W. Theory of crystal growth and interface motion in crystalline materials /J.W. Cahn //Acta Metallurgica, v. 8. – 1960. – p. 554.
- [11] Cahn J.W. The molecular mechanism of solidification /J.W. Cahn, W.B. Hillig, G.H. Sears //Acta Metallurgica, v. 12. – 1964. – p. 1421.
- [12] Кан Дж. Молекулярный механизм кристаллизации /Дж. Кан, В. Хиллиг, Дж. Сирс //УФН, т. 91. – 1967. – с. 691.
- [13] Jackson K.A. On the nature of crystal growth from the melt /K.A. Jackson, D.R. Uhlmann, J.D. Hunt //Journal of Crystal Growth, v. 1. – 1967. – № 1. – p. 1.
- [14] Guinier A. J. Imperfections of crystal lattices as investigated by the study of X-ray diffuse scattering /A. J. Guinier, R. Griffoul. // Proceedings of the Physical Society, v. 57, – № 4. – 1945, – p. 310.
- [15] Guinier A. J. /A. J. Guinier, R. Griffoul. //Compt. Rend. Acad. Sci. Paris. v. 260 – 1945, - p. 555

### **Публикации:**

Основные результаты по теме диссертации изложены в **трех** печатных изданиях, включенных в перечень ВАК для защиты кандидатских работ по специальности «**Физика конденсированного состояния**».

1) Байков Ю.А. Структура переходной двухфазной зоны при кристаллизации двухкомпонентных металлических расплавов. /Ю.А.Байков, Н.И.Петров //Известия высших учебных заведений. Физика, № 4, – 2014, – с. 35.

2) Байков Ю.А. Особенности разупорядочения при кристаллизации двухкомпонентных металлических расплавов в модели переходной двухфазной зоны. /Ю.А.Байков, Н.И.Петров //Известия высших учебных заведений. Физика, № 5, – 2014, – с. 32.

3) Байков Ю.А. Изучение явления разупорядочения двухкомпонентных кристаллов, растущих из металлических 50% двухкомпонентных расплавов в области температур ниже точки Кюри. /Ю.А.Байков, Н.И.Петров // Вестник МГОУ. Сер. «Физика - Математика», № 2, – 2014, № 2, – с. 63.

Первые две работы переведены на английский язык и опубликованы в других печатных изданиях

4) Baikov Yu.A. Structure of the transitive two-phase zone in crystallization of two-component metal melts /Yu.A.Baikov, N.I.Petrov //Russian Physics Journal, Vol.57, – № 4, August, – 2014, – p. 459.

5) Baikov Yu.A. Special features of disordering in crystallization of two-component metal melts in the model of two-phase transitive zone» /Yu.A.Baikov, N.I.Petrov //Russian Physics Journal, Vol.57, – № 5, September, – 2014, – p. 598.