

## ОСОБЕННОСТИ МИКРОКРИСТАЛЛИЗАЦИИ 50 % ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ В МОДЕЛИ ПЕРЕХОДНОЙ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЫ В ДИФФУЗИОННО-РЕЛАКСАЦИОННОМ РЕЖИМЕ

© 2019 Ю. А. Байков<sup>1</sup>, Н. И. Петров<sup>1✉</sup>, М. И. Тимошина<sup>2</sup>, Е. В. Акимов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева  
Миусская пл., 9, 125047 Москва, Российская Федерация

<sup>2</sup>Московский технический университет связи и информатик  
Авиамоторная ул., 8а, 111024 Москва, Российская Федерация

**Аннотация.** В диффузионно-релаксационном режиме кристаллизации 50% двухкомпонентных металлических расплавов в модели переходной двухфазной зоны оценены термодинамические параметры, при которых возможно образование полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической элементарной решеткой стехиометрического состава. Исследована область вблизи точки разупорядочения кристаллической фазы и установлен закон стремления параметра дальнего порядка к нулю при достижении критической температуры (переохлаждения) системы двухкомпонентный расплав-кристалл. Установлены кинетические особенности роста кристаллической фазы в точке разупорядочения. Установлен закон восстановления упорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы во времени. Оценены возможные значения времен релаксации при переходе из разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической элементарной ячейкой к полностью упорядоченной. Установлены кинетические особенности образования полностью упорядоченного двухкомпонентного кристалла.

**Ключевые слова:** переходная двухфазная зона, концентрации мономеров роста, параметр дальнего порядка в двухкомпонентных кубических элементарных ячейках, скорости кристаллизации металлических расплавов.

### ВВЕДЕНИЕ

Проблемы изучения фазовых превращений в концентрированных средах были и остаются весьма актуальными как с научной, так и с практической точек зрения. Одной из этих проблем в настоящее время являются процессы типа порядок-беспорядок и обратного типа беспорядок-порядок, возникающие при кристаллизации, например, 50 % двухкомпонентных металлических расплавов с образованием кристаллической фазы с простой кубической элементарной ячейкой и стехиометрического состава. Особенно это актуально при изменении режима кристаллизации подобных двухкомпонентных расплавов. В работах [1–7] были изучены вопросы

разупорядочения 50 % двухкомпонентных кристаллических фаз с простой кубической элементарной ячейкой и связанные с ними кинетические особенности роста подобных фаз в кинетическом режиме кристаллизации, в котором отсутствовали диффузионные процессы.

Экспериментальные факты получения полностью или частично разупорядоченных двухкомпонентных металлических кристаллических фаз были представлены на примере сплавов Au–Ag при их росте из соответствующих расплавов в работах [8–9]. Эти сплавы в кристалле обладают ОЦК – решеткой, которая, как известно, может быть представлена совокупностью двух подрешеток элементарной кубической сингонии. Процессы передачи хаоса двухкомпонентных

✉ Петров Николай Иванович, e-mail: [nik\\_petrov@mail.ru](mailto:nik_petrov@mail.ru)

расплавов подобных систем могут быть объяснены при наличии кинетического (бездиффузионного) режима кристаллизации, описанного в модели переходной двухфазной зоны в цитированных работах [4–7]. В работах [8–9] получение разупорядоченных двухкомпонентных кристаллов наблюдалось в области температур, меньших температуры Кюри  $T_C$ , когда по представлениям классической термодинамики должна существовать полностью упорядоченная двухкомпонентная кристаллическая система. Положение корней меняется при смене режима кристаллизации, то есть переход типа порядок-беспорядок возможен и в новом диффузионно-релаксационном режиме кристаллизации. Этот процесс описания восстановления упорядоченной кристаллической двухкомпонентной фазы в модели переходной двухфазной зоны (ПДЗ) является весьма актуальным. В настоящей работе исследуется возможность восстановления полностью упорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической элементарной ячейкой и стехиометрического состава при переходе от кинетического к диффузионно-релаксационному режиму кристаллизации 50 % двухкомпонентных металлических расплавов. Это стало возможным при создании флуктуационной теории нормального роста кристаллов в модели ПДЗ, описанной в работах [1, 5–7].

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

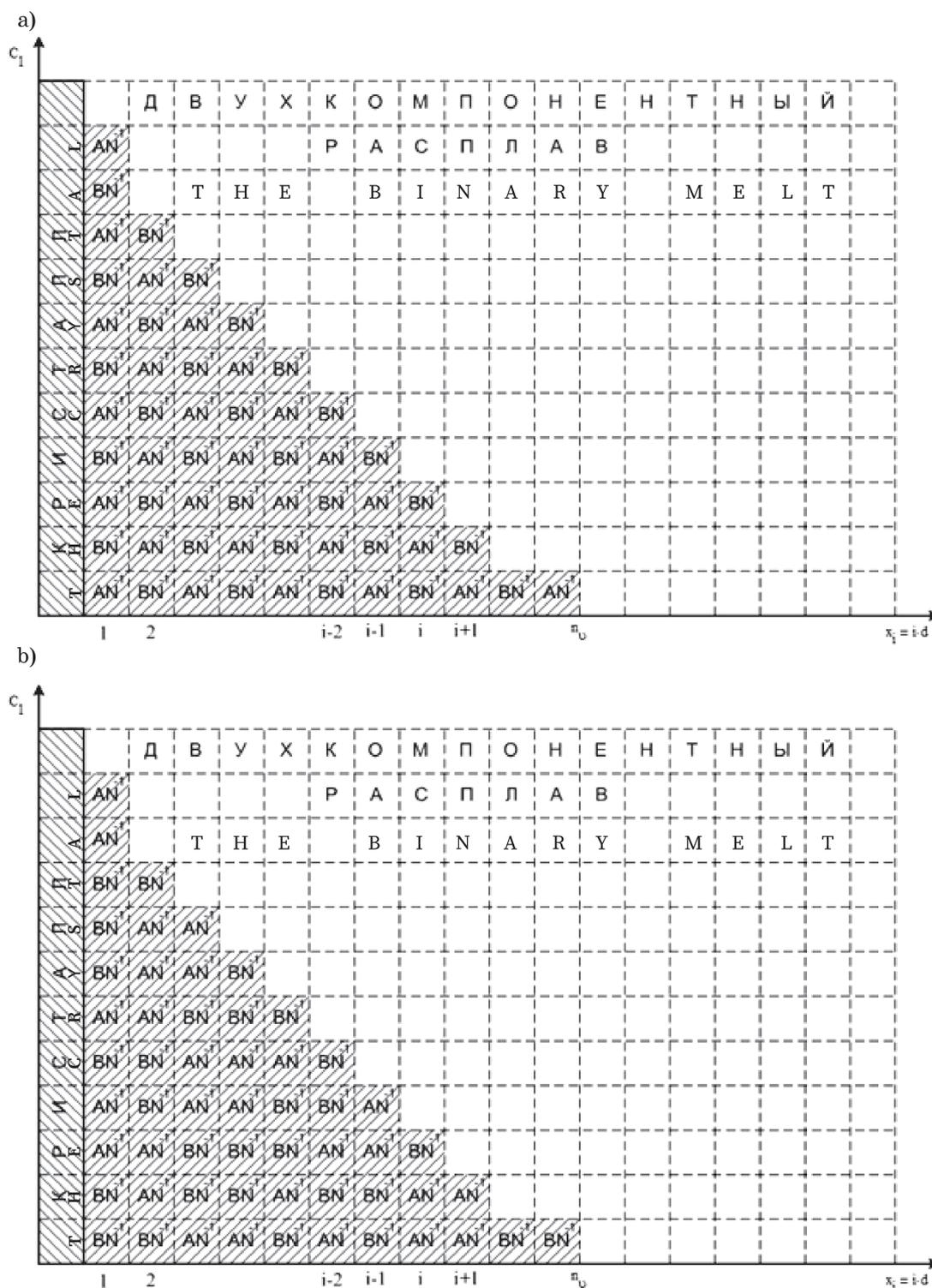
В модели переходной двухфазной зоны в пространстве концентраций мономеров роста обоих агрегатных состояний (расплав и кристалл) найти значения термодинамических параметров, связанных с энергиями взаимодействия мономеров роста в приближении ближайших соседей и температурой кристаллизующейся системы расплав–кристалл, при которых наступает полное разупорядочение двухкомпонентной кристаллической фазы с элементарной кубической ячейкой и стехиометрического состава. Исследовать окрестность точки разупорядочения, установить закон, по которому параметр дальнего порядка стремится к нулю непрерывным образом, опре-

делить особенности кинетики роста полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы. Оценить время релаксации, при котором происходит процесс полного упорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы, установить закон, по которому параметр дальнего порядка стремится к своему максимальному значению ( $\eta = 1$ ) при временах, больших этого времени релаксации. Установить особенности кинетики кристаллизации 50 % двухкомпонентных металлических расплавов при образовании полностью упорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы с элементарной кубической ячейкой и стехиометрического состава.

На рис. 1а, б представлены схемы ПДЗ в пространстве концентраций мономеров роста для случаев полностью упорядоченной а) двухкомпонентной кристаллической фазы, кристаллизующейся из расплава 50% двухкомпонентных сплавов, с простой кубической ячейкой и стехиометрического состава и полностью разупорядоченной б) двухкомпонентной кристаллической фазы. Как видно из этого рисунка, в модели ПДЗ в пространстве концентраций мономеров роста граница раздела двух соприкасающихся массивных фаз носит «ступенчатый» характер и является подобием модели поверхности кристалла Косселя–Странского.

Наличие ступеней с изломами, в которых происходят акты обмена мономерами роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$  ( $\alpha, \beta = A, B$ ), где  $N$  – общее количество мономеров роста обоих агрегатных состояний в каждом моноатомной толщине слое ПДЗ, с соответствующими частотами присоединения мономера роста  $\beta N^{-1}$  из расплава к мономеру роста  $\alpha N^{-1}$  в кристалле и отрыва мономера роста  $\gamma N^{-1}$  в кристалле от мономера роста  $\beta N^{-1}$ , обозначаемых как  $\omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$  и  $\omega_{-\beta\gamma}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$  в конфигурации с высотами изломов  $K_i$  слева и  $K_{i+1}$  справа от столбика « $i$ » ( $i = 1, 2, \dots, n_0$ ), позволяет описать эволюцию во времени развития ПДЗ конечной протяженности в диффузионно-релаксационном режиме. Эта эволюция описывается следующим дифференциально-разностным кинетическим уравнением

$$\begin{aligned} \frac{dX_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, t)}{dt} = & \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{c}_{i+1}-\bar{c}_{i-1})<0} \omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1}) X_{\alpha}^{(j)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1}, t) + \\ & + \sum_{\gamma} \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{c}_{i+1}-\bar{c}_{i-1})<0} \omega_{-\beta\gamma}^{(kj)}(K_i + N^{-1}, K_{i+1}) X_{\alpha\beta\gamma}^{(jk)}(K_i + N^{-1}, K_{i+1}, t) - \\ & - \sum_{\gamma} \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{c}_{i+1}-\bar{c}_{i-1})<0} \omega_{+\beta\gamma}^{(kj)}(K_i, K_{i+1}) X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}, t) - \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{c}_{i+1}-\bar{c}_{i-1})<0} \omega_{-\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}, t) = -\frac{X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, t)}{\tau_{pi}}. \end{aligned} \quad (1)$$



**Рис. 1.** Модель ПДЗ «ступенчатой» формы: *a* – для упорядоченной кристаллической двухкомпонентной фазы; *b* – для разупорядоченной кристаллической двухкомпонентной фазы  
 [Fig. 1. The step-like (DTZ) model: *a* – in the case of ordered binary crystalline phase; *b* – in the case of disordered binary crystalline phase]

Здесь  $K_i = \bar{C}_i - \bar{C}_{i-1}$ ,  $K_{i+1} = \bar{C}_{i+1} - \bar{C}_i$  – высоты изломов ступени Коссея–Странского, то есть перепады средних концентраций мономеров роста кристаллической фазы на границе монослоев  $(i, i-1)$  и  $(i+1, i)$  соответственно;  $X_{\alpha}^{(j)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1}, t)$ ,  $X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}, t)$ ,  $X_{\alpha\beta\gamma}^{(kj)}(K_i + N^{-1}, K_{i+1}, t)$ ,  $X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, t)$  – меняющиеся со временем структурные функции, описывающие вероятности найти столбики мономеров роста кристаллической фазы в соответствующей конфигурации всей ПДЗ (см. [1–4]). Минимальный перепад усредненных концентраций мономеров роста кристаллической фазы в монослоях с индексами  $(i-1)$  и  $(i+1)$  равен  $\Delta_i = \bar{C}_{i-1} - \bar{C}_{i+1} = 2N^{-1}$ . Величина  $\tau_{pi}$  есть среднее время релаксации в  $i$ -м монослое ПДЗ ( $i = 1, 2, \dots, n_0$ ) при переходе двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической ячейкой из полностью разупорядоченного состояния в частично упорядоченное состояние, когда параметр разупорядоченности  $\Delta\eta(t) = 1 - \eta(t)$  уменьшается в « $e$ » раз,  $\eta$  – параметр дальнего порядка. При введении новых функций  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i) = X_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, 0)$  дифференциально-разностное уравнение (1) в диффузионно-релаксационном режиме кристаллизации ПДЗ переходит в следующее выражение, описывающее структуру ПДЗ в начальный момент ее эволюции:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{C}_{i+1}-\bar{C}_{i-1})<0} \omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1}) Z_{\alpha}^{(j)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1}) + \\
 & + \sum_{\gamma} \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{C}_{i+1}-\bar{C}_{i-1})<0} \omega_{-\beta\gamma}^{(kj)}(K_i + N^{-1}, K_{i+1}) Z_{\alpha\beta\gamma}^{(kj)}(K_i + N^{-1}, K_{i+1}) - \\
 & - \sum_{\gamma} \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{C}_{i+1}-\bar{C}_{i-1})<0} \omega_{+\beta\gamma}^{(kj)}(K_i, K_{i+1}) Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) - \\
 & - \sum_{K_{i+1}=0}^{(\bar{C}_{i+1}-\bar{C}_{i-1})<0} \omega_{-\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) = - \frac{Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i)}{\tau_{pi}}.
 \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь верхние индексы  $(jk)$ ,  $(kj)$  величин  $\omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i - N^{-1}, K_{i+1})$ ,  $\omega_{+\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$ ,  $\omega_{+\beta\gamma}^{(kj)}(K_i, K_{i+1})$ ,  $\omega_{-\beta\gamma}^{(kj)}(K_i + N^{-1}, K_{i+1})$ ,  $\omega_{-\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$ ,  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$ ,  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i)$  и так далее отмечают номера подрешеток « $j$ » и « $k$ », к которым относятся мономеры роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$  соответственно ( $\alpha, \beta, \gamma = A, B$ ), ( $j, k = 1, 2$ ) и так далее. В данной модели ПДЗ элементарная кубическая ячейка состоит из двух подрешеток с чередующимися узлами.

Структурные функции  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1})$ ,  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i)$  определяют вероятность либо в момент времени  $t = 0$  между изломами  $K_i$  и  $K_{i+1}$  найти мономеры роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ , принадлежащие узлам подрешеток « $j$ » и « $k$ » соответственно (см.

рис. 1 *a, b*), либо при тех же условиях в конфигурации у любого излома высоты  $K_i$  найти столбик, замыкаемый мономерами роста  $\alpha N^{-1}$ ,  $\beta N^{-1}$ . Здесь  $\alpha, \beta = A, B$ ;  $j, k = 1, 2$ , величины изломов отвечают требованиям «ступенчатой» формы границы раздела фаз расплав-кристалл  $K_i \leq 0$ ,  $K_{i+1} \leq 0$ . Корреляции высот изломов отвечают условиям:

$$Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i, K_{i+1}) = \frac{Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i) Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_{i+1})}{Z_{\alpha\beta}^{(jk)}}$$

где

$$Z_{\alpha\beta}^{(jk)} = \sum_{K_i=0}^{(\bar{C}_{i+1}-\bar{C}_{i-1})<0} Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i),$$

а структурные функции  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(K_i)$  и им подобные были определены в классе произведений

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

$\lambda$  – параметр «шероховатости» границы фаз, заключенный в интервале  $0 < \lambda \leq 1$ ,  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(0)$  – вероятность найти столбик кристаллической фазы, замыкаемый мономерами роста  $\alpha N^{-1}$  и  $\beta N^{-1}$  в узлах подрешеток « $j$ » и « $k$ » соответственно у излома высоты  $K_i = 0$ . В этих условиях кинетическое уравнение эволюции переходной двухфазной зоны (2) при  $\alpha = A$ ,  $\beta = B$ ,  $j = 1$ ,  $k = 2$  переходит в следующую систему независимых уравнений относительно шести переменных  $Z_{\alpha\beta}^{(jk)}(0)$ ,  $\lambda$  и  $\eta$ :

$$\begin{cases} a_1 Z_{AA}^{(12)}(0) + a_5 Z_{AB}^{(12)}(0) & = 0 \\ a_5 Z_{AA}^{(12)}(0) + a_2 Z_{AB}^{(12)}(0) & = 0 \\ a_3 Z_{BA}^{(12)}(0) + a_5 Z_{BB}^{(12)}(0) & = 0 \\ a_5 Z_{BA}^{(12)}(0) + a_4 Z_{BB}^{(12)}(0) & = 0 \\ b_1 Z_{AA}^{(12)}(0) + b_5 Z_{BA}^{(12)}(0) - b_5 Z_{BB}^{(12)}(0) & = R \lambda^{N^{-1}} \\ -b_6 Z_{AA}^{(12)}(0) + b_2 Z_{AB}^{(12)}(0) + b_4 Z_{BB}^{(12)}(0) & = R \lambda^{N^{-1}} \end{cases} \tag{3}$$

В уравнениях системы (3) параметр «шероховатости» границы раздела фаз расплав-кристалл неявным образом зависит от меняющегося во времени параметра дальнего порядка  $\eta(t)$

и параметра  $q_2 = \exp\left[-\frac{2\varepsilon_{AA}^{12}}{T}\right]$ , где  $\varepsilon_{AA}^{12}$  – взятая с

обратным знаком энергия связи мономеров роста  $A - A$ , находящихся в кристаллической и жидкой фазах,  $T$  – температура кристаллизующейся двухкомпонентной системы, отсчитываемая от температуры линии ликвидус  $T_L$  двухкомпонентной системы расплав-кристалл. Ниже введены

параметры  $R = (v_+/v)q_2$ ,  $R_1 = (v_+/v)q_2^{1/2}$ , где  $v_+$  и  $v$  – частоты колебаний мономеров роста около положений равновесия в расплаве и кристалле соответственно. Коэффициенты  $a_i$  ( $i = 1, \dots, 5$ ) и  $b_j$  ( $j = 1, \dots, 6$ ) представляют собой некоторые комбинации параметров «шероховатости»  $\lambda(q_2, \eta)$ ,  $R$ ,  $R_1$ ,  $N$ , времени релаксации  $\tau_{pi}$ , а также структурных коэффициентов  $S_{\rho\alpha\beta}^{(jk)}(\eta, m)$ , где  $p = (1, 2, 3)$ , зависящих от параметра дальнего порядка  $\eta(t)$  и числа « $m$ », фигурирующего в уравнении связи  $\epsilon_{AB}^{11} = m\epsilon_{AA}^{11}$ . Обычно  $m \geq 1$ , поскольку, как правило, энергии связи частиц одного сорта в кристалле меньше по модулю соответствующих энергий мономеров роста разных сортов. Все коэффициенты  $a_i$ ,  $b_j$ ,  $S_{\rho\alpha\beta}^{(jk)}$  отвечают требованиям симметрии уравнений, в которых они фигурируют, таким образом, что система уравнений инвариантна относительно переобозначений  $A \rightleftharpoons B$ , то есть относительно преобразования  $\eta \rightarrow -\eta$ .

### РАЗУПОРЯДОЧЕНИЕ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В ДИФфуЗИОННО-РЕЛАКСАЦИОННОМ РЕЖИМЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Для полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы, когда при  $\eta = 0$ , все функции  $Z_{AA}^{(12)}(0)$  отвечают условиям  $Z_{AA}^{(12)}(0) = Z_{BB}^{(12)}(0)$ ,  $Z_{AB}^{(12)}(0) = Z_{BA}^{(12)}(0)$ , система уравнений (3) переходит в систему уравнений

$$\begin{cases} a_1^{||ol} Z_{AA}^{(12)}(0) + a_5^{||ol} Z_{AB}^{(12)}(0) = 0 \\ a_5^{||ol} Z_{AA}^{(12)}(0) + a_2^{||ol} Z_{AB}^{(12)}(0) = 0 \\ (b_1^{||ol} - b_5^{||ol}) Z_{AA}^{(12)}(0) - b_2^{||ol} Z_{AB}^{(12)}(0) = R(\lambda^{||ol})^{N-1} \end{cases} \quad (4)$$

Расширенная матрица системы (4) есть

$$\begin{pmatrix} a_1^{||ol} & a_5^{||ol} & 0 \\ a_5^{||ol} & a_2^{||ol} & 0 \\ (b_1^{||ol} - b_5^{||ol}) & b_2^{||ol} & R(\lambda^{||ol})^{N-1} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_1^{||ol} & a_5^{||ol} & 0 \\ 0 & \left[ b_2^{||ol} - \left( \frac{a_5^{||ol}}{a_1^{||ol}} \right) (b_1^{||ol} - b_5^{||ol}) \right] & R(\lambda^{||ol})^{N-1} \\ 0 & a_2^{||ol} - \left( \frac{(a_5^{||ol})^2}{a_1^{||ol}} \right) & 0 \end{pmatrix}$$

Условие совместности уравнений системы (4) приводит к равенству

$$a_1^{||ol} a_2^{||ol} = (a_5^{||ol})^2.$$

Коэффициенты для полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы есть

$$a_1^{||ol} = a_2^{||ol} \approx R(\lambda^{||ol})^{2N-1} + \left( \left( \frac{1}{v\tau_{pi}} \right) - 2R \right) (\lambda^{||ol})^{N-1};$$

$$a_5^{||ol} = R(\lambda^{||ol})^{2N-1}; \quad b_1^{||ol} = b_2^{||ol} \approx 2R_1 - \left( \frac{1}{v\tau_{pi}} \right);$$

$$b_5^{||ol} = (\lambda^{||ol})^{N-1} \left[ q_1^{m+2} + (\lambda^{||ol})^{N-1} q_1^{(1/2)(3m+1)} \right];$$

$$b_2^{||ol} - \left( \frac{a_5^{||ol}}{a_1^{||ol}} \right) (b_1^{||ol} - b_5^{||ol}) \approx 4R_1 - \left( \frac{R}{v\tau_{pi}} \right) \left( 1 + \left( \frac{R_1}{R} \right) \right).$$

Поскольку  $\left( \frac{a_5^{||ol}}{a_1^{||ol}} \right) = \left( \frac{a_2^{||ol}}{a_5^{||ol}} \right) = \left( \frac{1}{Rv\tau_{pi}} \right) - 1$ , то ес-

тественные требования  $Z_{AA}^{(12)} > 0$ ,  $Z_{AB}^{(12)} > 0$  приводят к следующему условию, накладываемому на время релаксации  $\tau_{pi} > \left( \frac{1}{Rv} \right) = \left( \frac{1}{v_+ q_1} \right) = \left( \frac{1}{v_+ q_2} \right)$ ,

где  $q_1 = \exp \left[ -\frac{\epsilon_{AA}^{11}}{T} \right]$ . При этом  $q_1 = q_2$ , когда

число « $n$ », фигурирующее в уравнении связи энергий взаимодействий мономеров роста  $\epsilon_{AA}^{12} = \epsilon_{AB}^{12} = n\epsilon_{AA}^{11} = n\epsilon_{BB}^{11}$ , равно  $n = 1/2$ .

Решение системы уравнений (4) при соответствующих временах релаксации дает для функций  $Z_{\alpha\beta}^{(12)}(0)$  ( $\alpha, \beta = A, B$ ) следующие выражения:

$$Z_{AA}^{(12)}(0) = Z_{BB}^{(12)}(0) = \frac{R \left[ 1 - \left( \frac{1}{Rv\tau_{pi}} \right) \right]}{4R_1 - \left( \frac{2}{v\tau_{pi}} \right) \left[ 1 + \left( \frac{R_1}{R} \right) \right]}, \quad (5)$$

$$Z_{AB}^{(12)}(0) = Z_{BA}^{(12)}(0) = \frac{R}{4R_1 - \left( \frac{2}{v\tau_{pi}} \right) \left[ 1 + \left( \frac{R_1}{R} \right) \right]}.$$

При следующих значениях термодинамических параметров  $\epsilon_{AA}^{11} = 10^{-1}$  эв;  $T = 500$  К;  $q_2 = 0.13$ ;  $R_1 / R = 2,5$ ;  $R = 0.13$ ;  $v \approx v_+ = 10^{13}$  Гц и времени релаксации

$$\tau_{pi} = 10^{-11} \text{ сек} > \frac{1}{Rv}$$

имеем следующие оценки для структурных функций  $Z_{AA}^{(12)}(0) = Z_{BB}^{(12)}(0)$ ,  $Z_{AB}^{(12)}(0) = Z_{BA}^{(12)}(0)$  для полностью разупорядоченной двухкомпонентной фазы

$$Z_{AA}^{(12)}(0) = Z_{BB}^{(12)}(0) \approx Z_{AB}^{(12)}(0) = Z_{BA}^{(12)}(0) = 0.1.$$

Порядок параметра «шероховатости» границы раздела фаз в модели ПДЗ для полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы можно оценить из условий нормировки функций  $Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(K_i)$ :

$$\sum_{\alpha,\beta} \sum_{K_i=0}^{\bar{C}_{i+1}-\bar{C}_{i-1}<0} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(K_i) = \sum_{\alpha,\beta} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0) \sum_{K_i=0}^{\bar{C}_{i+1}-\bar{C}_{i-1}<0} \lambda^{|K_i|} =$$

$$= Z^{||0||}(0) \frac{1 - (\lambda^{||0||})^{N^{-1} + \bar{C}_{i-1} - \bar{C}_{i+1}}}{1 - (\lambda^{||0||})^{N^{-1}}} = 1. \quad (6)$$

Если положить

$$Z^{||0||}(0) = \sum_{\alpha,\beta} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0) = 0.4,$$

тогда из (6) следует, что при  $\Delta_i = \bar{C}_{i-1} - \bar{C}_{i+1} = 2N^{-1}$  – минимальное значение разности высот изломов в моно слоях  $(i-1)$  и  $(i+1)$  ПДЗ, величина параметра «шероховатости»  $\lambda^{||0||}$  определяется решением уравнения

$$(\lambda^{||0||})^{2N^{-1}} + (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} - 1.5 = 0, \quad (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \approx 0.8$$

и следовательно

$$\lambda^{||0||} \approx (0.8)^N \ll 1. \quad (7)$$

Для полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы коэффициенты  $S_{2\alpha\beta}^{||0||^{(12)}} = S_{2\alpha\beta}^{||0||^{11}}, S_{3\alpha\beta}^{||0||^{(12)}} = S_{3\alpha\beta}^{||0||^{11}}$  имеют вид:

$$S_{2AA}^{||0||^{(12)}} = S_{2AA}^{||0||^{11}} = S_{2BB}^{||0||^{11}} = q_1^{m+2};$$

$$S_{2AB}^{||0||^{(12)}} = S_{2AB}^{||0||^{11}} = S_{2BA}^{||0||^{11}} = q_1^{2m+1};$$

$$S_{3AA}^{||0||^{(12)}} = S_{3AA}^{||0||^{11}} = S_{3BB}^{||0||^{11}} = q_1^{(1/2)(3m+5)};$$

$$S_{2AB}^{||0||^{(12)}} = S_{2AB}^{||0||^{11}} = S_{2BA}^{||0||^{11}} = q_1^{(1/2)(5m+3)}.$$

Для средней приведенной скорости кристаллизации ПДЗ в случае полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы имеем выражение в диффузионно-релаксационном режиме в момент времени  $t = 0$

$$\overline{V}(0) = \frac{V(0)}{v} = \sum_{i=1}^{n_0} \overline{V}_i(0),$$

где

$$\overline{V}_i(0) = F_i(R, R_1, \lambda^{||0||}) - \sum_{\alpha,\beta} S_{3\alpha\beta}^{||0||^{11}} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0) -$$

$$- (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \left( \frac{1 - (\lambda^{||0||})^{\Delta_i}}{1 - (\lambda^{||0||})^{N^{-1}}} \right) \sum_{\alpha,\beta} S_{2\alpha\beta}^{||0||^{11}} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0)$$

и

$$F_i(R, R_1, \lambda^{||0||}) =$$

$$= \left[ \frac{2}{(\lambda^{||0||})^{\Delta_i + N^{-1}}} \right] \left[ R (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \left( 1 - (\lambda^{||0||})^{\Delta_i} \right) + R_1 \left( 1 - (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \right) \right].$$

При  $\Delta_i = 2N^{-1}$ , вышеприведенных термодинамических параметрах и значении для параметра «шероховатости» (7) имеем оценочно  $F_i(R, R_1, \lambda^{||0||}) \approx 0.5$ ;

$$\sum_{\alpha,\beta} S_{3\alpha\beta}^{||0||^{11}} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0) \approx 0.2q_1^{(11/2)};$$

$$(\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \left[ 1 + (\lambda^{||0||})^{2N^{-1}} \right] \sum_{\alpha,\beta} S_{2\alpha\beta}^{||0||^{11}} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0) \approx 3q_1^5$$

при  $m = 2$ .

Кинетическое равновесие для системы неупорядоченная двухкомпонентная кристаллическая фаза – 50 % двухкомпонентный металлический расплав наступает при условии  $\overline{V}_i(0) = 0$ , то есть имеет место равенство

$$\frac{2}{1 + (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} + (\lambda^{||0||})^{2N^{-1}}} \left[ R_1 + R (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \left( 1 + (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \right) \right] -$$

$$- \left[ (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \left( 1 + (\lambda^{||0||})^{N^{-1}} \right) \right] \sum_{\alpha,\beta} S_{2\alpha\beta}^{||0||^{11}} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0) +$$

$$+ \sum_{\alpha,\beta} S_{3\alpha\beta}^{||0||^{11}} Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0) = 0.$$

В приведенных оценках термодинамических параметров для параметра  $q_{1e}$ , при котором реализуется кинетическое равновесие между неупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазой с элементарной кубической ячейкой и 50% двухкомпонентным металлическим расплавом, имеем уравнение:

$$0.5 - 3q_{1e}^5 = 0,$$

что определяет

$$q_{1e} \approx \sqrt[5]{0.17} \approx 0.7. \quad (8)$$

Для определения критического параметра  $q_{1k}$ , при достижении которого наступает полное разупорядочение двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической решеткой и стехиометрического состава, необходимо воспользоваться методикой линеаризации исходной системы (3), учитывающей диффузионно-релаксационные процессы в кристаллической фазе ПДЗ. Эта методика, использованная в кинетическом режиме кристаллизации 50 % двухкомпонентных металлических расплавов и описанная в работах [1, 7–9], применима и в диффузионно-релаксационном режиме. Поскольку в уравнениях системы (3) все коэффициенты  $a_i(\eta, m, q_1)$  ( $i = 1, \dots, 5$ ),  $b_j(\eta, m, q_1)$  ( $j = 1, \dots, 6$ ) и структурные функции  $Z_{\alpha\beta}^{||0||^{(12)}}(0)[\eta, q_1]$  являются функциями параметров  $\eta$ ,  $q_1$  и числа  $m$ , то в окрестностях точки разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы (при критическом переохлаждении  $\Delta T = T_L - T_k$  системы рас-

плав-кристалл, где  $T_L$  – температура линии ликвидус) можно ввести параметры малости:

$$\begin{aligned} \Delta x_1(\eta) &= Z_{AA}^{(12)}(0) - Z_{AA}^{||0||}(12)(0); \\ \Delta x_2(\eta) &= Z_{BB}^{(12)}(0) - Z_{BB}^{||0||}(12)(0); \\ \Delta x_3(\eta) &= Z_{AB}^{(12)}(0) - Z_{AB}^{||0||}(12)(0); \\ \Delta x_4(\eta) &= Z_{BA}^{(12)}(0) - Z_{BA}^{||0||}(12)(0); \end{aligned}$$

$$\Delta x_5(\eta) = \lambda(\eta) - \lambda^{||0||}; \beta_0 = |(m-1) \ln q_1| \eta$$

и шесть новых коэффициентов:

$$\begin{aligned} K_1 &= \gamma_1 Z_{AA}^{||0||}(12)(0) + \gamma_3 Z_{AB}^{||0||}(12)(0); K_2 = \delta_1 Z_{AA}^{||0||}(12)(0); \\ K_3 &= \gamma_2 Z_{AB}^{||0||}(12)(0) + \gamma_5 Z_{AA}^{||0||}(12)(0); K_4 = \delta_2 Z_{AA}^{||0||}(12)(0); \\ K_5 &= (\gamma_4 - \gamma_6) Z_{AA}^{||0||}(12)(0) + \gamma_5 Z_{AB}^{||0||}(12)(0) - \left(\frac{R}{N}\right); \end{aligned}$$

$$K_6 = (\delta_3 - \delta_5) Z_{AA}^{0(12)}(0) + \delta_4 Z_{AB}^{0(12)}(0),$$

где

$$\begin{aligned} \delta_1 &= 0.3q_1^{\frac{1}{2}(3m+5)}; \delta_2 = 0,3q_1^{\frac{1}{2}(5m+3)}; \\ \delta_3 &= 0.8q_1^{m+2} + 1.5q_1^{\frac{1}{2}(3m+5)}; \\ \delta_4 &= 1.5q_1^{\frac{1}{2}(5m+3)} - 0,32q_1^{\frac{1}{2}(5m+1)}; \\ \delta_5 &= 0.8q_1^{m+2} + 0.32q_1^{\frac{1}{2}(m+3)}; \\ \gamma_1 &= \left(\frac{1}{N}\right) \left[ \left(\frac{1}{v\tau_{pi}}\right) - 0.4R - q_1^{\frac{1}{2}(3m+5)} \right]; \\ \gamma_2 &= \left(\frac{1}{N}\right) \left[ 1.6R - q_1^{\frac{1}{2}(5m+3)} \right]; \\ \gamma_3 &= \left(\frac{1,6R}{N}\right); \gamma_4 = \left(\frac{q_1^{m+2}}{N}\right); \gamma_5 = \left(\frac{1,6}{N}\right); \\ \gamma_6 &= \left(\frac{1}{N}\right) \left[ q_1^{m+2} + 1.6q_1^{\frac{1}{2}(m+3)} \right]. \end{aligned}$$

В таком случае система уравнений в линеаризованном виде относительно шести параметров  $\Delta x_i(\eta) \ll 1$  и  $\beta_0 \ll 1$  принимает следующий вид:

$$\begin{cases} a_1^{||0||} \Delta x_1 + a_5^{||0||} \Delta x_3 + K_1 \Delta x_5 - K_2 \beta_0 = 0 \\ a_1^{||0||} \Delta x_2 + a_5^{||0||} \Delta x_4 + K_1 \Delta x_5 + K_2 \beta_0 = 0 \\ a_1^{||0||} \Delta x_1 + a_5^{||0||} \Delta x_3 + K_3 \Delta x_5 + K_4 \beta_0 = 0 \\ a_5^{||0||} \Delta x_2 + a_2^{||0||} \Delta x_4 + K_3 \Delta x_5 - K_4 \beta_0 = 0 \\ b_1^{||0||} \Delta x_1 - b_5^{||0||} \Delta x_2 + b_2^{||0||} \Delta x_4 + K_5 \Delta x_5 - K_6 \beta_0 = 0 \\ -b_1^{||0||} \Delta x_1 + b_1^{||0||} \Delta x_2 + b_2^{||0||} \Delta x_3 + K_5 \Delta x_5 + K_6 \beta_0 = 0 \end{cases} \quad (9)$$

В силу свойств симметрии  $\lambda(\eta)$  и структурных функций  $Z_{\alpha\beta}^{(12)}(0)[\eta, q_1]$ , зависящих от параметра дальнего порядка, малые параметры

$\Delta x_i(\eta)$  можно представить в виде разложения по параметру  $\eta \ll 1$  с точностью до третьего порядка малости:

$$\begin{aligned} \Delta x_1(\eta) &\approx c_1 \eta + c_2 \eta^2 + c_3 \eta^3; \\ \Delta x_2(\eta) &\approx -c_1 \eta + c_2 \eta^2 - c_3 \eta^3; \\ \Delta x_3(\eta) &\approx d_1 \eta + d_2 \eta^2 + d_3 \eta^3; \\ \Delta x_4(\eta) &\approx -d_1 \eta + d_2 \eta^2 - d_3 \eta^3; \Delta x_5(\eta) \approx c_4 \eta^2, \end{aligned}$$

где  $c_1, c_2, c_3, c_4, d_1, d_2, d_3$  – некоторые константы. В силу того обстоятельства, что при росте функции  $Z_{AA}^{(12)}(0)[\eta, q_1]$  функция  $Z_{AB}^{(12)}(0)[\eta, q_1]$  убывает и в силу инвариантности средней скорости кристаллизации  $V(\eta) = V(-\eta)$  относительно преобразования  $\eta \rightarrow -\eta$ , имеет место равенство  $c_1 = -d_1$ . Если последовательно вычесть из первого уравнения системы (9) второе уравнение, из третьего уравнения четвертое уравнение, из пятого уравнения шестое уравнение, то можно получить совокупность трех уравнений

$$A_1 \eta + B_1 \eta^3 = 0; A_2 \eta + B_2 \eta^3 = 0; A_3 \eta + B_3 \eta^3 = 0$$

или ввиду условия  $\eta \neq 0$  в окрестности точки разупорядочения имеем окончательно:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 \eta^2 = 0; A_2 + B_2 \eta^2 = 0; A_3 + B_3 \eta^2 = 0 \\ \text{где } A_1 = \alpha_1^{||0||} c_1 + \alpha_5^{||0||} d_1 - K_2(m-1) \ln q_1; \\ B_1 = \alpha_1^{||0||} c_3 + \alpha_5^{||0||} d_3; \\ A_2 = \alpha_5^0 c_1 + \alpha_2^0 d_1 + K_4(m-1) \ln q_1; \\ B_2 = \alpha_5^0 c_3 + \alpha_2^0 d_3; \\ A_3 = (b_1^0 + b_5^0) c_1 - b_2^0 d_1 - K_6(m-1) \ln q_1; \\ B_3 = (b_1^0 + b_5^0) c_3 - b_2^0 d_3. \end{cases} \quad (10)$$

Если ввести новые функции, зависящие от меняющегося со временем параметра дальнего порядка  $\eta(t)$ :

$$f_1(\eta) = A_1 + B_1 \eta^2; f_2(\eta) = A_2 + B_2 \eta^2;$$

$$f_3(\eta) = A_3 + B_3 \eta^2,$$

то условием общего решения уравнений:

$$f_1(\eta) = 0, f_2(\eta) = 0; f_1(\eta) = 0, f_3(\eta) = 0;$$

$$f_2(\eta) = 0, f_3(\eta) = 0$$

является равенство нулю трех соответствующих результатов:

$$\begin{aligned} R_1[f_1(\eta), f_2(\eta)] &= \begin{vmatrix} B_1 & 0 & A_1 & 0 \\ 0 & B_1 & 0 & A_1 \\ B_2 & 0 & A_2 & 0 \\ 0 & B_2 & 0 & A_2 \end{vmatrix} = \\ &= (B_1 A_2 - A_1 B_2)^2 = 0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{A_1}{A_2}\right) &= \left(\frac{B_1}{B_2}\right) = \Omega_1; \\ R_2[f_1(\eta), f_3(\eta)] &= \begin{vmatrix} B_1 & 0 & A_1 & 0 \\ 0 & B_1 & 0 & A_1 \\ B_3 & 0 & A_3 & 0 \\ 0 & B_3 & 0 & A_3 \end{vmatrix} = \\ &= (B_1 A_3 - A_1 B_3)^2 = 0; \\ \left(\frac{A_1}{A_3}\right) &= \left(\frac{B_1}{B_3}\right) = \Omega_2; \\ R_3[f_2(\eta), f_3(\eta)] &= \begin{vmatrix} B_2 & 0 & A_2 & 0 \\ 0 & B_2 & 0 & A_2 \\ B_3 & 0 & A_3 & 0 \\ 0 & B_3 & 0 & A_3 \end{vmatrix} = \\ &= (B_2 A_3 - A_2 B_3)^2 = 0; \\ \left(\frac{A_2}{A_3}\right) &= \left(\frac{B_2}{B_3}\right) = \Omega_3, \end{aligned}$$

где  $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$  некоторые неизвестные величины. Откуда следуют две новые системы из трех уравнений каждая:

$$\begin{cases} A_1 - \Omega_1 A_2 = 0; \\ A_1 - \Omega_2 A_3 = 0; \\ A_2 - \Omega_3 A_3 = 0 \end{cases} \text{ и } \begin{cases} B_1 - \Omega_1 B_2 = 0; \\ B_1 - \Omega_2 B_3 = 0; \\ B_2 - \Omega_3 B_3 = 0. \end{cases}$$

Введя коэффициенты  $\alpha_1^{||ol}, \alpha_2^{||ol}, \alpha_3^{||ol}, b_1^{||ol}, b_2^{||ol}, b_3^{||ol}, K_2, K_4, K_6$  эти две системы уравнений эквивалентны новым системам уравнений при условии  $c_1 = -d_1, \mu = \left(\frac{c_3}{d_3}\right)$

$$\begin{cases} E_1 - \Omega_1 E_2 = 0; \\ D_1 - \Omega_1 D_2 = 0, \end{cases} \begin{cases} E_1 - \Omega_2 E_3 = 0; \\ D_1 - \Omega_2 D_3 = 0, \end{cases} \begin{cases} E_2 - \Omega_3 E_3 = 0; \\ D_2 - \Omega_3 D_3 = 0, \end{cases} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} E_1 &= (\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol})c_1 - K_2(m-1)\ln q_1, \\ E_2 &= (\alpha_5^{||ol} - \alpha_2^{||ol})c_1 + K_4(m-1)\ln q_1, \\ E_3 &= (b_1^{||ol} + b_2^{||ol} + b_3^{||ol})c_1 - K_6(m-1)\ln q_1, \\ D_1 &= \alpha_1^{||ol}\mu + \alpha_5^{||ol}, \quad D_2 = \alpha_5^{||ol}\mu + \alpha_2^{||ol}, \\ D_3 &= (b_1^{||ol} + b_3^{||ol})\mu - b_2^{||ol}. \end{aligned} \quad (12)$$

В уравнениях систем (11) третья неизвестная величина  $\Omega_3 = \left(\frac{\Omega_2}{\Omega_1}\right)$  выражается через другие неизвестные величины. Введем две пары новых функций:

$$g_1(\Omega_1) = E_1 - E_2\Omega_1; \quad g_2(\Omega_1) = D_1 - D_2\Omega_1;$$

$$g_3(\Omega_2) = E_1 - E_3\Omega_2; \quad g_4(\Omega_2) = D_1 - D_3\Omega_2.$$

Условием общего решения уравнений  $g_1(\Omega_1) = 0, g_2(\Omega_1) = 0$  является равенство нулю их результата, то есть

$$R_1[g_1(\Omega_1), g_2(\Omega_1)] = \begin{vmatrix} E_2 & 0 & E_1 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 & E_1 \\ D_2 & 0 & D_1 & 0 \\ 0 & D_2 & 0 & D_1 \end{vmatrix} = \\ = (E_2 D_1 - E_1 D_2)^2 = 0$$

или

$$R_1 E_1 D_2 = E_2 D_1.$$

С учетом определений величин  $E_1, E_2, D_1, D_2$  из равенства  $R_1[g_1(\Omega_1), g_2(\Omega_1)] = 0$  получаем выражение для величины  $\mu$  через соответствующие коэффициенты:

$$\mu = -\frac{\alpha_2^{||ol} K_2 + \alpha_5^{||ol} K_4}{\alpha_1^{||ol} K_4 + \alpha_5^{||ol} K_2} \quad (13)$$

Отсюда следует, что коэффициент

$$d_3 = \frac{c_3}{\mu} = -\frac{\alpha_1^{||ol} K_4 + \alpha_5^{||ol} K_2}{\alpha_2^{||ol} K_2 + \alpha_5^{||ol} K_4}$$

и коэффициент  $B_1 = \alpha_1^{||ol} c_3 + \alpha_5^{||ol} d_3 = 0$  при условии  $\alpha_1^{||ol} \alpha_2^{||ol} = (\alpha_5^{||ol})^2$  - совместности системы (4). Аналогичным образом имеем:  $B_2 = \alpha_5^{||ol} c_3 + \alpha_2^{||ol} d_3 = 0$ . Для коэффициентов  $A_3$  и  $B_3$ , фигурирующих в (10), получаем выражения:

$$\begin{aligned} A_3 &= (b_1^{||ol} + b_2^{||ol} + b_3^{||ol})c_1 - K_6(m-1)\ln q_1, \\ B_3 &= c_3 \frac{(b_1^{||ol} + b_3^{||ol})(\alpha_2^{||ol} K_2 + \alpha_5^{||ol} K_4) + b_2^{||ol}(\alpha_1^{||ol} K_4 + \alpha_5^{||ol} K_2)}{\alpha_2^{||ol} K_2 + \alpha_5^{||ol} K_4} = \\ &= c_3 \left( b_1^{||ol} + b_3^{||ol} - \frac{b_2^{||ol}}{\mu} \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Условием равенства нулю результата  $R_2[g_3(\Omega_2), g_4(\Omega_2)] = 0$  определяется совместность уравнений  $g_3(\Omega_2) = 0, g_4(\Omega_2) = 0$ .

$$R_2[g_3(\Omega_2), g_4(\Omega_2)] = \begin{vmatrix} E_3 & 0 & E_1 & 0 \\ 0 & E_3 & 0 & E_1 \\ D_3 & 0 & D_1 & 0 \\ 0 & D_3 & 0 & D_1 \end{vmatrix} = \\ = (E_3 D_1 - E_1 D_3)^2 = 0$$

или

$$E_3 D_1 = E_1 D_3$$

С учетом выражения (13) имеем величину

$$\mu + 1 = -\frac{(\alpha_5^{||ol} - \alpha_2^{||ol})K_2 + (\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol})K_4}{\alpha_1^{||ol} K_4 - \alpha_5^{||ol} K_2},$$

которая из равенства  $E_3 D_1 = E_1 D_3$  позволяет определить величину  $c_1$ :

$$c_1 = \frac{[\alpha_2^{||ol}(b_1^{||ol} + b_5^{||ol}) + \alpha_5^{||ol} b_2^{||ol}] K_2^2 (m-1) \ln q_1}{[\alpha_1^{||ol} b_2^{||ol} + \alpha_5^{||ol} (b_1^{||ol} + b_5^{||ol})][(\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_4 - (\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_2]} + \frac{[\alpha_5^{||ol} (b_1^{||ol} + b_5^{||ol}) + \alpha_1^{||ol} b_2^{||ol}] K_2 K_4 (m-1) \ln q_1}{[\alpha_1^{||ol} b_2^{||ol} + \alpha_5^{||ol} (b_1^{||ol} + b_5^{||ol})][(\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_4 - (\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_2]} = c_{11}. \quad (15)$$

Совместность двух последних уравнений систем (11) требует равенства нулю результата следующих функций

$$g_5(\Omega_3) = E_2 - \Omega_3 E_3 = 0, \quad g_6(\Omega_3) = D_2 - \Omega_3 D_3 = 0, \quad \text{то есть}$$

$$R_3 [g_5(\Omega_3), g_6(\Omega_3)] = \begin{vmatrix} E_3 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & E_3 & 0 & E_2 \\ D_3 & 0 & D_2 & 0 \\ 0 & D_3 & 0 & D_2 \end{vmatrix} = (E_3 D_2 - E_2 D_3)^2 = 0.$$

Равенство  $E_3 D_1 = E_1 D_3$  приводит к следующему значению для величины  $c_1$ :

$$c_1 = \frac{[\alpha_5^{||ol}(b_1^{||ol} + b_5^{||ol}) + \alpha_1^{||ol} b_2^{||ol}] K_4^2 (m-1) \ln q_1}{[\alpha_2^{||ol}(b_1^{||ol} + b_5^{||ol}) + \alpha_5^{||ol} b_2^{||ol}][(\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_2 - (\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_4]} + \frac{[\alpha_2^{||ol}(b_1^{||ol} + b_5^{||ol}) + \alpha_5^{||ol} b_2^{||ol}] K_2 K_4 (m-1) \ln q_1}{[\alpha_2^{||ol}(b_1^{||ol} + b_5^{||ol}) + \alpha_5^{||ol} b_2^{||ol}][(\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_2 - (\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol}) K_4]} = c_{12}. \quad (16)$$

При использовании формулы (13) для величины  $\mu = \left(\frac{c_3}{d_3}\right)$  из выражений (10) можно получить следующие результаты  $B_1 = 0, B_2 = 0$  и, следовательно  $A_1 = 0, A_2 = 0$ , соответственно, что дает для величины  $c_1$  два разных выражения:

$$[c_1]_I = \frac{K_2 (m-1) \ln q_1}{\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol}}, \quad [c_1]_{II} = \frac{K_4 (m-1) \ln q_1}{\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol}},$$

соответствующих условиям  $A_1 = 0$  и  $A_2 = 0$ , где  $\left(\frac{K_4}{K_2}\right) = q_1^{m-1}$ . В общем случае  $[c_1]_I \neq [c_1]_{II}$ , причем

$$c_{11} = \frac{K_2 (m-1) \ln q_1}{\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol}}, \quad c_{12} = \frac{K_4 (m-1) \ln q_1}{\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol}}.$$

При числе  $m \sim 1$  величины  $c_{11}$  и  $c_{12}$  практически совпадают. Для оценки коэффициентов  $A_3$  и  $B_3$  приняты следующие приближенные выражения для величин

$$\alpha_1^{||ol} \approx \alpha_2^{||ol} \approx \left(\frac{0.8}{v\tau_{pi}}\right) - 0.96R; \quad \alpha_5^{||ol} \approx 0.64R; \\ b_1^{||ol} \approx b_2^{||ol} \approx 2R_1 - \left(\frac{1}{v\tau_{pi}}\right); \quad b_5^{||ol} \approx 0.64q_1^{\frac{1}{2}(m+3)} \ll 1; \\ K_2 \approx 3 \cdot 10^{-2} q_1^{\frac{1}{2}(3m+5)}; \quad K_4 \approx 3 \cdot 10^{-2} q_1^{\frac{1}{2}(5m+5)}; \\ K_6 \approx 1.6q_1^{m+2}.$$

При

$$c_1 = \frac{K_4 (m-1) \ln q_1}{\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol}} = -\frac{K_4 (m-1) \ln q_1}{0.12},$$

когда  $\alpha_2^{||ol} - \alpha_5^{||ol} \approx 0.12$ , имеем

$$A_3 = \left\{ 0, 24q_1^{\frac{1}{2}(5m+3)} \left[ \left(\frac{1}{v\tau_{pi}}\right) - 4R_1 \right] \right\} (m-1) \ln q_1,$$

$B_3 \approx 2R_1 c_3$  для  $v\tau_{pi} \approx 10, R_1 = \left(\frac{v_+}{v}\right) q_1^{\frac{1}{2}}$ . Тогда параметр дальнего порядка, как функция времени релаксации  $\tau_{pi}$ , частот колебаний  $v, v_+$ , температуры  $T$ , связанный с параметром  $q_1$  и числом  $m$ , определяется следующим выражением:

$$\eta(q_1, \tau_{pi}) = \sqrt{-\left(\frac{A_3}{B_3}\right)} = \sqrt{\frac{0.24q_1^{\frac{1}{2}(5m+3)} (m-1) \ln q_1}{c_3} \sqrt{2 - \frac{1}{2R_1 v\tau_{pi}}}},$$

где константа  $c_3 < 0$ . При значении

$$c_1 = \frac{K_2 (m-1) \ln q_1}{\alpha_1^{||ol} - \alpha_5^{||ol}}$$

получаем соответствующее выражение для параметра дальнего порядка

$$\eta(q_1, \tau_{pi}) = \sqrt{\frac{0.24q_1^{\frac{1}{2}(5m+3)} (m-1) \ln q_1}{c_3} \sqrt{2 - \frac{1}{2R_1 v\tau_{pi}}}}.$$

Значение параметра  $q_{1k}$ , при котором полное разупорядочение кристаллической фазы существует, определяется уравнением

$$q_{1k} = \left(\frac{1}{16v_+^2 \tau_{pi}^2}\right). \quad (17)$$

Если ввести новую функцию

$$F(q_1, \tau_{pi}) = 2q_1^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{1}{2R_1 v\tau_{pi}}\right),$$

разложить ее в ряд Тейлора по степеням  $(q_1 - q_{1k})$  в окрестности точки разупорядочения  $q_{1k}$ , то можно получить закон изменения параметра

дальнего порядка как функции от температуры кристаллизующейся двухкомпонентной системы расплав-кристалл:

$$\eta_1(T) = \frac{1}{T_k} \sqrt{\frac{0,24q_1^{\frac{1}{2}(5m+2)} \epsilon_{AA}^{11} (m-1) \ln q_1}{c_3}} \sqrt{T-T_k}$$

при  $c_1 = \frac{K_4 (m-1) \ln q_1}{\alpha_2^{\parallel 0\parallel} - \alpha_5^{\parallel 0\parallel}}$ ,

$$\eta_2(T) = \frac{1}{T_k} \sqrt{\frac{0,24q_1^{\frac{1}{2}(5m+5)} \epsilon_{AA}^{11} (m-1) \ln q_1}{c_3}} \sqrt{T-T_k}$$

при  $c_1 = \frac{K_2 (m-1) \ln q_1}{\alpha_1^{\parallel 0\parallel} - \alpha_5^{\parallel 0\parallel}}$ . (18)

Как видно из формул (18) параметр дальнего порядка изменяется с температурой (переохлаждением системы 50 % двухкомпонентный металлический расплав-кристалл) в соответствии с термодинамическим переходом Брэгга-Вильямса.

Графически температурные зависимости  $\eta_1(T)$ ,  $\eta_2(T)$  представлены на рис. 2, где  $q_{1k} = \exp\left[-\frac{\epsilon_{AA}^{11}}{T_k}\right]$ ,  $q_{1e} = \exp\left[-\frac{\epsilon_{AA}^{11}}{T_e}\right]$ ,  $q_{1c} = \exp\left[-\frac{\epsilon_{AA}^{11}}{T_c}\right]$ ,  $T_k$ ,  $T_e$ ,  $T_c$ , – температуры разупорядочения, кинетического равновесия и Кюри соответственно.

Кривая 1 – классическая термодинамическая кривая. Кривые 2 и 3 – кинетические кривые разупорядочения в приближении Брэгга-Вильямса при разных значениях константы  $c_1$ .

Величина критического параметра  $q_{1k}$ , при достижении которого кристаллическая двухкомпонентная фаза предполагается быть полностью разупорядоченной, зависит от времени релаксации  $\tau_{pi}$  ( $i = 1, 2, \dots, n_0$ ), приближенные оценки которого дает условие  $\tau_{pi} > \left(\frac{1}{Rv}\right)$ , но его

точное значение может дать лишь исследование образования двухкомпонентной кристаллической фазы в окрестности точки полного упорядочения, когда  $\eta = 1$ .

Полученные формулы (18) определяют изменение параметра дальнего порядка двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической ячейкой и стехиометрического состава в зависимости от температуры кристаллизующейся системы расплав-кристалл лишь в начальный момент кристаллизации  $t = 0$  в окрестности точки разупорядочения  $q_{1k}$ . Однако с течением времени при определенном времени релаксации разупорядоченная двухкомпонентная кристаллическая фаза в диффузионно-релаксационном режиме должна восстановить полную упорядоченность, то есть должно быть  $\eta(t \gg \tau_{pi}) = 1$ .

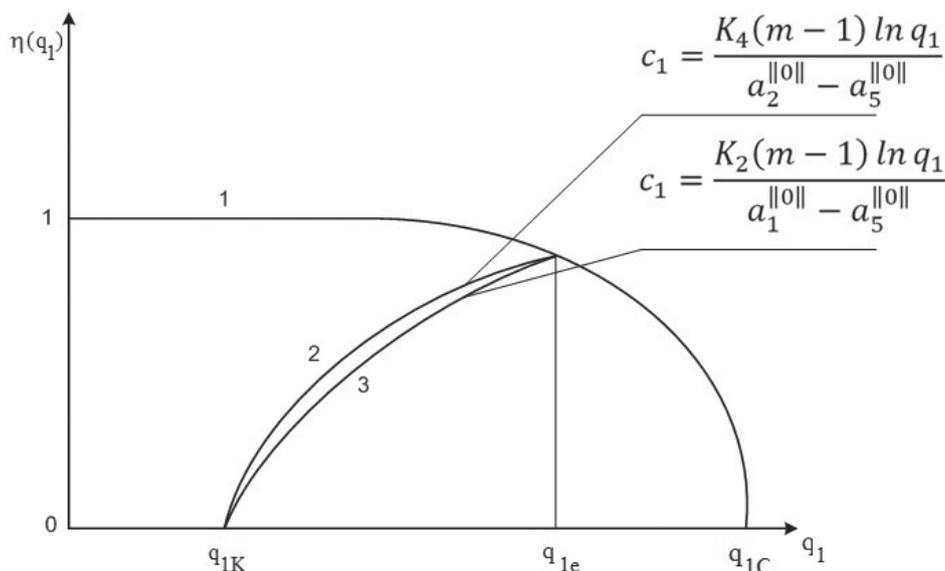


Рис. 2. Зависимость кривых разупорядочения параметра дальнего порядка  $\eta(q_1)$  от величины

$$q_1 = \exp\left[-\frac{\epsilon_{AA}^{11}}{T}\right] \text{ при разных значениях константы } c_1$$

[Fig. 2. The far-order  $\eta(q_1)$  parameter disordering dependences on  $q_1 = \exp\left[-\frac{\epsilon_{AA}^{11}}{T}\right]$  parameter at the  $c_1$  – different values]

**УПОРЯДОЧЕННАЯ  
ДВУХКОМПОНЕНТНАЯ  
КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ ФАЗА С  
КУБИЧЕСКОЙ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ  
ЯЧЕЙКОЙ И СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО  
СОСТАВА В ДИФФУЗИОННО-  
РЕЛАКСАЦИОННОМ РЕЖИМЕ  
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В МОДЕЛИ  
ПЕРЕХОДНОЙ ДВУХФАЗНОЙ ЗОНЫ**

Если ввести для полностью упорядоченной двухкомпонентной фазы ( $\eta = 1$ ) функции  $Z_{\alpha\beta}^{(12)}(0)$  и соответственно коэффициенты  $a_i$  ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ),  $b_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 6$ ), то система (3) принимает вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{a_1 Z_{AA}^{(12)}(0)} + \overline{a_5 Z_{AB}^{(12)}(0)} = 0 \\ \overline{a_5 Z_{AA}^{(12)}(0)} + \overline{a_2 Z_{AB}^{(12)}(0)} = 0 \\ \overline{a_3 Z_{BA}^{(12)}(0)} + \overline{a_5 Z_{BB}^{(12)}(0)} = 0 \\ \overline{a_5 Z_{BA}^{(12)}(0)} + \overline{a_4 Z_{BB}^{(12)}(0)} = 0 \\ \overline{b_1 Z_{AA}^{(12)}(0)} + \overline{b_3 Z_{BA}^{(12)}(0)} - \overline{b_5 Z_{BB}^{(12)}(0)} = R\lambda^{N-1} \\ -\overline{b_6 Z_{AA}^{(12)}(0)} + \overline{b_2 Z_{AB}^{(12)}(0)} + \overline{b_4 Z_{BB}^{(12)}(0)} = R\lambda^{N-1} \end{array} \right. \quad (19)$$

Система уравнений (19) должна, как и система (3), обладать свойством инвариантности при переобозначениях  $A \rightleftharpoons B$ . Это приводит к равенству функций  $Z_{AA}^{(12)}(0) = Z_{BB}^{(12)}(0)$ ,  $Z_{AB}^{(12)}(0) = Z_{BA}^{(12)}(0)$ , а также к равенству коэффициентов  $\overline{a_1} = \overline{a_4}$ ,  $\overline{a_2} = \overline{a_3}$ ,  $\overline{b_1} = \overline{b_4}$ ,  $\overline{b_2} = \overline{b_3}$ ,  $\overline{b_5} = \overline{b_6}$ . В силу определения функциональных коэффициентов  $a_i(\eta)$  ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ),  $b_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 6$ ), и связанных с ними коэффициентов  $S_{\alpha\beta}^{(jk)}(\eta)$  это возможно лишь при условии  $m = 1$ . При этом условии выполняется равенство энергий связи мономеров роста ( $A-A$ ) и ( $A-B$ ) в первом приближении, то есть с энергетической точки зрения функции  $Z_{AA}^{(12)}(0)$  и  $Z_{AB}^{(12)}(0)$  совпадают. В таком случае система шести независимых уравнений переходит в систему

$$\left\{ \begin{array}{l} \overline{a_1 Z_{AA}^{(12)}(0)} + \overline{a_5 Z_{AB}^{(12)}(0)} = 0; \\ \overline{a_5 Z_{AA}^{(12)}(0)} + \overline{a_2 Z_{AB}^{(12)}(0)} = 0; \\ (\overline{b_1} - \overline{b_5}) \overline{Z_{AA}^{(12)}(0)} + \overline{b_2 Z_{AB}^{(12)}(0)} = R(\overline{\lambda})^{N-1}. \end{array} \right. \quad (20)$$

Здесь учтено, что  $\overline{a_1}(\eta = 1) = \overline{a_2}(\eta = 1)$ . Условие совместности уравнений (20), когда ранг матри-

цы  $\left( \begin{array}{ccc} \overline{a_1} & \overline{a_5} & 0 \\ \overline{a_5} & \overline{a_1} & 0 \\ (\overline{b_1} - \overline{b_5}) & \overline{b_2} & R(\overline{\lambda})^{N-1} \end{array} \right)$  равен рангу матрицы

$$\left( \begin{array}{cc} \overline{a_1} & \overline{a_5} \\ \overline{a_5} & \overline{a_1} \\ (\overline{b_1} - \overline{b_5}) & \overline{b_2} \end{array} \right), \text{ эквивалентно выполнению усло-}$$

вия  $\overline{a_1}^{-2} = \overline{a_5}^{-2}$ . Имеющему физический смысл условию совместности системы (20) равенству  $\overline{a_1} = -\overline{a_5}$  отвечают следующие решения систе-

мы уравнений при  $\overline{b_1} \approx \overline{b_2} \approx 2R_1 - \left( \frac{1}{\nu\tau_{pi}} \right) \approx 0,7$  для

$R_1 = 0.4$ ;  $\nu\tau_{pi} = 10$ ;  $\varepsilon_{AA}^{11} \approx 10^{-1}$  эВ;  $T = 500$  К, когда  $q_1 = q_2 = 0.13$ ;  $\overline{b_5} \approx q_1^2$ :

$$\overline{Z_{AA}^{(12)}(0)} = \overline{Z_{AB}^{(12)}(0)} = \left( \frac{R}{1.4} \right) (\overline{\lambda})^{N-1} \ll 1, \quad (21)$$

$$\overline{\lambda} = (0,7)^N \ll 1.$$

Для больших чисел  $N \gg 1$  приблизительно имеет место равенство  $\overline{\lambda} = \lambda^{||0||} = (0,8)^N \ll 1$ , то есть параметры «шероховатости» ПДЗ для разупорядоченной и полностью упорядоченной фаз совпадают.

Линеаризируем систему неоднородных уравнений (3) в окрестности точки полного упорядочения  $\eta = 1$  с учетом системы (19) относительно параметров малости  $\Delta y_i$  ( $\Delta\eta$ ) ( $i = 1, 2, \dots, 5$ ), которые зависят от параметра разупорядоченности  $\Delta\eta(t) = (1 - \eta(t)) \ll 1$ . Здесь

$$\begin{aligned} \Delta y_1(\Delta\eta) &= Z_{AA}^{(12)}(0)[\eta] - \overline{Z_{AA}^{(12)}(0)}; \\ \Delta y_2(\Delta\eta) &= Z_{BB}^{(12)}(0)[\eta] - \overline{Z_{BB}^{(12)}(0)}; \\ \Delta y_3(\Delta\eta) &= Z_{AB}^{(12)}(0)[\eta] - \overline{Z_{AB}^{(12)}(0)}; \\ \Delta y_4(\Delta\eta) &= Z_{BA}^{(12)}(0)[\eta] - \overline{Z_{BA}^{(12)}(0)}; \\ \Delta y_5(\Delta\eta) &= \lambda(\eta) - \overline{\lambda}. \end{aligned}$$

С учетом свойств функций  $Z_{AA}^{(12)}(0)[- \eta] = Z_{BB}^{(12)}(0)[\eta]$ ,  $Z_{AB}^{(12)}(0)[- \eta] = Z_{BA}^{(12)}(0)[\eta]$  с точностью до членов порядка малости  $(\Delta\eta)^3$  имеем выражения

$$\begin{aligned} \Delta y_1(\Delta\eta) &\approx -h_1 \Delta\eta + h_2 (\Delta\eta)^2 - h_3 (\Delta\eta)^3; \\ \Delta y_2(\Delta\eta) &\approx h_1 \Delta\eta + h_2 (\Delta\eta)^2 + h_3 (\Delta\eta)^3; \\ \Delta y_3(\Delta\eta) &\approx -l_1 \Delta\eta + l_2 (\Delta\eta)^2 - l_3 (\Delta\eta)^3; \\ \Delta y_4(\Delta\eta) &\approx l_1 \Delta\eta + l_2 (\Delta\eta)^2 + l_3 (\Delta\eta)^3; \\ \Delta y_5(\Delta\eta) &= h_4 (\Delta\eta)^2; \lambda(-\eta) = \lambda(\eta) \end{aligned} \quad (22)$$

где  $h_1, h_2, h_3, h_4, l_1, l_2, l_3$  – некоторые константы,  $\overline{\beta_0} = (1 - \eta) \ln q_1 = \Delta\eta \ln q_1$ .

Линеаризованная система имеет такой вид при учете, что

$$\begin{cases} \overline{Z_{AA}^{(12)}}(0) = \overline{Z_{AB}^{(12)}}(0) = \overline{Z_{BA}^{(12)}}(0) = \overline{Z_{BB}^{(12)}}(0); \\ \overline{a\Delta y_1 + a_5\Delta y_3 + K_1\Delta y_5 + K_2\beta_0} = 0; \\ \overline{a\Delta y_2 + a_5\Delta y_4 + K_1\Delta y_5 + K_2\beta_0} = 0; \\ \overline{a_5\Delta y_1 + a\Delta y_3 + K_1\Delta y_5 + K_2\beta_0} = 0; \\ \overline{a_5\Delta y_2 + a\Delta y_4 + K_1\Delta y_5 + K_2\beta_0} = 0; \\ \overline{b_1\Delta y_1 - b_5\Delta y_2 + b_3\Delta y_4 + K_3\Delta y_5 + K_4\beta_0} = 0; \\ \overline{-b_5\Delta y_1 + b_1\Delta y_2 + b_3\Delta y_3 + K_3\Delta y_5 + K_4\beta_0} = 0 \end{cases} \quad (23)$$

где:

$$\begin{aligned} \overline{a} &= \left( \frac{0,8}{v\tau_{pi}} \right) - 0,96R + 0,2q_1^4; \quad \overline{a_5} = 0,64R; \\ \overline{b_1} &= 2R_1 - \left( \frac{1}{v\tau_{pi}} \right) + q_1^5(0,8 + q_1); \\ \overline{b_3} &= 2R_1 - \left( \frac{1}{v\tau_{pi}} \right) + q_1^2(q_1^2 - 0,64); \\ \overline{b_5} &= 0,8q_1^2(q_1 + 0,8); \\ \overline{K_1} &= (\overline{\gamma} - \overline{\gamma_5})\overline{Z_{AA}^{(12)}}(0); \quad \overline{K_2} = \overline{Z_{AA}^{(12)}}(0)\overline{\delta}; \\ \overline{K_3} &= \overline{Z_{AA}^{(12)}}(0)[\overline{\gamma_5} - \overline{\gamma_7} - \overline{\gamma_9}] - \left( \frac{R}{N(0,8)^{N-2}} \right); \\ \overline{K_4} &= \overline{Z_{AA}^{(12)}}(0)[\overline{\delta_5} + \overline{\delta_7} - \overline{\delta_9}]; \\ \overline{\gamma} &= \left( \frac{1}{N} \right) \left\{ \left[ \frac{1,28R}{(0,8)^N} \right] + \left[ \left( \frac{1}{v\tau_{pi}} \right) - 2R \right] \left[ \frac{1}{(0,8)^{N-2}} \right] - \left[ \frac{q_1^4}{(0,8)^{N-1}} \right] \right\}; \\ \overline{\gamma_5} &= \left[ \frac{1,28R}{N(0,8)^N} \right]; \quad \overline{\gamma_7} = \left[ \frac{1,28q_1^2}{N(0,8)^N} \right]; \\ \overline{\gamma_9} &= \left( \frac{q_1^2}{N} \right) \left\{ \left[ \frac{q_1}{(0,8)^{N-2}} \right] + \left[ \frac{1,28}{(0,8)^N} \right] \right\}; \quad \overline{\delta} = 0,3q_1^4; \\ \overline{\delta_5} &= q_1^5(0,8 + 1,5q_1); \quad \overline{\delta_7} = q_1^2(1,5q_1^2 - 0,32); \\ \overline{\delta_9} &= 0,8q_1^2(0,4 - q_1). \end{aligned}$$

После аналогичных преобразований, проведенных с системой (9), из шести уравнений (23) можно получить три простые уравнения:

$$\begin{cases} \overline{A_1 + B_1}(\Delta\eta)^2 = 0 = f_1(\Delta\eta); \\ \overline{A_2 + B_2}(\Delta\eta)^2 = 0 = f_2(\Delta\eta); \\ \overline{A_3 + B_3}(\Delta\eta)^2 = 0 = f_3(\Delta\eta); \\ \overline{A_1} = \overline{a}h_1 + \overline{a_5}l_1; \quad \overline{A_2} = \overline{a_5}h_1 + \overline{a}l_1; \\ \overline{A_3} = (\overline{b_1} + \overline{b_5})h_1 - \overline{b_3}l_1; \\ \overline{B_1} = \overline{a}h_2 + \overline{a_5}l_3; \quad \overline{B_2} = \overline{a_5}h_3 + \overline{a}l_3; \\ \overline{B_3} = (\overline{b_1} + \overline{b_5})h_3 - \overline{b_3}l_3. \end{cases} \quad (24)$$

Условиями совместности решений попарно уравнений системы (24) является равенство нулю следующих результатов:

$$\begin{aligned} R_1[f_1(\Delta\eta), f_2(\Delta\eta)] &= \begin{vmatrix} \overline{B_1} & 0 & \overline{A_1} & 0 \\ 0 & \overline{B_1} & 0 & \overline{A_1} \\ \overline{B_2} & 0 & \overline{A_2} & 0 \\ 0 & \overline{B_2} & 0 & \overline{A_2} \end{vmatrix} = \\ &= (\overline{B_1}\overline{A_2} - \overline{A_1}\overline{B_2})^2 = 0, \end{aligned}$$

что приводит к равенству

$$\frac{\overline{A_1}}{\overline{A_2}} = \frac{\overline{B_1}}{\overline{B_2}} = \omega_1$$

или системе уравнений

$$\begin{cases} \overline{A_1} - \omega_1\overline{A_2} = 0 \\ \overline{B_1} - \omega_1\overline{B_2} = 0 \end{cases},$$

где  $\omega_1$  – некоторое число. Аналогичным образом равенство нулю результатов  $R_2[f_1(\Delta\eta), f_3(\Delta\eta)]$  и  $R_3[f_2(\Delta\eta), f_3(\Delta\eta)]$  приводит к следующим парам уравнений:

$$\begin{cases} \overline{A_1} - \omega_2\overline{A_3} = 0 \\ \overline{B_1} - \omega_2\overline{B_3} = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} \overline{A_2} - \omega_3\overline{A_3} = 0 \\ \overline{B_2} - \omega_3\overline{B_3} = 0 \end{cases},$$

где  $\omega_2, \omega_3$  – некоторые разные числа. Если ввести две новые величины  $\overline{\chi} = \left( \frac{h_1}{l_1} \right)$  и  $\overline{\mu} = \left( \frac{h_3}{l_3} \right)$ , то

вместо трех пар уравнений, даваемых равенствами нулю результатов  $R_1[f_1(\Delta\eta), f_2(\Delta\eta)]$ ,  $R_2[f_1(\Delta\eta), f_3(\Delta\eta)]$ ,  $R_3[f_2(\Delta\eta), f_3(\Delta\eta)]$ , можно получить системы уравнений:

$$\begin{cases} \overline{g_1}(\omega_1) = \overline{E_1} - \overline{E_2}\omega_1; \\ \overline{g_2}(\omega_1) = \overline{D_1} - \overline{D_2}\omega_1, \end{cases} \quad \begin{cases} \overline{g_3}(\omega_2) = \overline{E_1} - \overline{E_5}\omega_2; \\ \overline{g_4}(\omega_2) = \overline{D_1} - \overline{D_3}\omega_2, \end{cases} \quad (25)$$

$$\begin{cases} \overline{g_5}(\omega_3) = \overline{E_2} - \overline{E_3}\omega_3; \\ \overline{g_6}(\omega_3) = \overline{D_2} - \overline{D_3}\omega_3, \end{cases}$$

где:

$$\begin{aligned} \overline{E_1} &= \overline{a} \cdot \overline{\chi} + \overline{a_5}; \quad \overline{E_2} = \overline{a_5} \cdot \overline{\chi} + \overline{a}; \quad \overline{E_3} = (\overline{b_1} + \overline{b_5})\overline{\chi} - \overline{b_3}; \\ \overline{D_1} &= \overline{a} \cdot \overline{\mu} + \overline{a_5}; \quad \overline{D_2} = \overline{a_5} \cdot \overline{\mu} + \overline{a}; \quad \overline{D_3} = (\overline{b_1} + \overline{b_5})\overline{\mu} - \overline{b_3}. \end{aligned}$$

Условие совместности решений первой пары уравнений приводит к равенству нулю результата

$$\begin{aligned} R_1[\overline{g_1}(\omega_1), \overline{g_2}(\omega_1)] &= \begin{vmatrix} \overline{E_2} & 0 & \overline{E_1} & 0 \\ 0 & \overline{E_2} & 0 & \overline{E_1} \\ \overline{D_2} & 0 & \overline{D_1} & 0 \\ 0 & \overline{D_2} & 0 & \overline{D_1} \end{vmatrix} = \\ &= (\overline{E_2}\overline{D_1} - \overline{E_1}\overline{D_2})^2 = 0, \end{aligned}$$

что приводит к уравнению  $(\bar{a} - \bar{a}_5)\bar{\chi} = (\bar{a} - \bar{a}_5)\bar{\mu}$ . Если  $\bar{\chi} = \bar{\mu}$ , то есть  $\left(\frac{h_1}{l_1}\right) = \left(\frac{h_3}{l_3}\right)$ , то это условие не определяет время релаксации  $\tau_{pi}$ . Если  $\bar{a} - \bar{a}_5 = (\bar{a} - \bar{a}_5)(\bar{a} + \bar{a}_5) = 0$ , то единственным решением, имеющим физическое содержание и согласующимся с условием совместности системы (4), записанной для полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы, является равенство  $\bar{a} = -\bar{a}_5$ , что определяет допустимое время релаксации

$$\tau_{pi} = \frac{1}{v(0,4R - 0,25q_1^4)}, \quad (26)$$

где при  $q_1 = q_{1k}$ , когда  $0,25q_{1k}^4 \ll 1$ , имеем  $\tau_{pi} \approx \left(\frac{5,2}{Rv}\right) > \left(\frac{1}{Rv}\right)$ , что необходимо для реализации разупорядоченной кристаллической фазы.

Совместность решений двух других пар уравнений системы (25), то есть равенства нулю результатов  $R_2[\bar{g}_3(\omega_2), \bar{g}_4(\omega_2)] = 0$  и

$R_3[\bar{g}_5(\omega_3), \bar{g}_6(\omega_3)] = 0$  приводит соответственно к уравнениям

$$\begin{aligned} \bar{a}_5(\bar{b}_1 + \bar{b}_5)(\bar{\mu} - \bar{\chi}) + \bar{a}\bar{b}_3(\bar{\mu} - \bar{\chi}) &= 0; \\ \bar{a}_5\bar{b}_3(\bar{\chi} - \bar{\mu}) + \bar{a}(\bar{b}_1 + \bar{b}_5)(\bar{\chi} - \bar{\mu}) &= 0, \end{aligned} \quad (27)$$

Одно из решений уравнений (27) есть  $\bar{\chi} = \bar{\mu}$ , то есть  $\left(\frac{h_1}{l_1}\right) = \left(\frac{h_3}{l_3}\right)$ , что не определяет время релаксации  $\tau_{pi2}$ , другое приводит к равенству  $\bar{b}_1 + \bar{b}_5 = \bar{b}_3$  при  $\bar{a} = -\bar{a}_5$ . Последнее равенство приводит к условию  $q_1 = 0$ , то есть к абсолютному нулю температуры, что согласуется с теоремой Нернста – порядок наступает при абсолютном нуле температуры.

Из уравнений (24) следует, что в точке полного упорядочения, когда  $\Delta\eta = 0$  имеем условия  $A_1 = A_2 = A_3 = 0$ , при одновременном требовании  $B_1 \neq 0, B_2 \neq 0, B_3 \neq 0$ . Из этого следует при  $a = -a_5$

$$\left(\frac{A_1}{B_1}\right) = \left(\frac{A_2}{B_2}\right) = \left[\left(\frac{l_1}{l_3}\right)\left(\frac{(\bar{\chi}-1)}{(\bar{\mu}-1)}\right)\right] = 0$$

и при  $\bar{\chi} \neq \bar{\mu}$  и  $\Delta\eta = 0$  имеем  $\bar{\chi} = 1$ . При  $\bar{\chi} \neq \bar{\mu}$  из

$$\left(\frac{A_3}{B_3}\right) = \left[\left(\frac{l_1}{l_3}\right)\left(\frac{((\bar{b}_1 + \bar{b}_5)\bar{\chi} - \bar{b}_3)}{((\bar{b}_1 + \bar{b}_5)\bar{\mu} - \bar{b}_3)}\right)\right]$$

следует, что  $\bar{A}_3 = 0$  при  $\bar{\chi} = 1$  возможно при условии  $\bar{b}_1 + \bar{b}_5 = \bar{b}_3$ , что реализуется лишь при абсолютном нуле температуры. Время релаксации  $\tau_{pi}$ , определяемое формулой (26), должно быть одинаково как для разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазы, так и для полностью упорядоченной фазы (при  $\eta = 1$ ). Упорядочение должно начинаться от точки полного разупорядочения кристаллической двухкомпонентной системы.

В полностью разупорядоченной двухкомпонентной кристаллической фазе ( $\eta_0 = 0$ ) при  $N \gg 1$ , когда коэффициенты  $\gamma_1 \sim \gamma_3 \sim 0$ , из первого уравнения системы (9) при  $d_1 = -c_1$  с точностью до членов  $\sim \eta^2$  имеем:

$$\begin{aligned} (\alpha_1^{||0} - \alpha_5^{||0})c_1 + (\alpha_1^{||0}c_2 + \alpha_5^{||0}d_2)\eta - \\ - \delta_1 Z_{AA}^{||0(12)}(0)(m-1)\ln q_1 = 0. \end{aligned}$$

Поскольку  $\max Z_{AA}^{(12)}(0)$  соответствует  $\min Z_{AB}^{(12)}(0)$  и

$$c_2 = \frac{d^2 Z_{AA}^{(12)}(0)[\eta]}{d\eta^2} \Big|_{\eta_0}, \quad d_2 = \frac{d^2 Z_{AB}^{(12)}(0)[\eta]}{d\eta^2} \Big|_{\eta_0},$$

взятых при  $\eta_0 = 0$ , имеем  $c_2 = -d_2$  и  $(\alpha_1^{||0} - \alpha_5^{||0})c_1 = K_2(m-1)\ln q_1$ . Следовательно, получаем соотношение из первого уравнения системы (9)

$$(\alpha_1^{||0} - \alpha_5^{||0})\eta c_2 + [K_2 - \delta_1 Z_{AA}^{||0(12)}(0)](m-1)\ln q_1 = 0, \quad (28)$$

где  $|K_2 - \delta_1 Z_{AA}^{||0(12)}(0)| \ll 1$  при  $m = 2$ .

Отсюда следует, что при малых, но конечных величинах

$$(\alpha_1^{||0} - \alpha_5^{||0}) \text{ и } \eta, |c_2| \ll 1.$$

При увеличении параметра дальнего порядка  $\eta$  функция  $Z_{AA}^{(12)}(0)[\eta]$  убывает, то есть  $c_1 < 0$  и достигает минимума, где

$$c_2 = \frac{\partial^2 Z_{AA}^{(12)}(0)[\eta]}{\partial \eta^2} > 0,$$

то есть величины  $c_1$  и  $c_2$  имеют разные знаки. Учитывая, что  $|c_1| \ll 1$  и  $|c_2| \ll 1$ , можно приближенно положить  $c_2 = -c_1$ , то есть

$$(\alpha_1^{||0} - \alpha_5^{||0})c_2 = -3 \cdot 10^{-2} q_1^{\frac{1}{2}(5m+5)} (m-1)\ln q_1.$$

Таким образом, из уравнения (28) получаем следующее выражение для параметра  $\eta$  вблизи точки  $\eta_0 = 0$ :

$$\begin{aligned} \eta = \frac{[-K_2 + \delta_1 Z_{AA}^{||0(12)}(0)](m-1)\ln q_1}{(\alpha_1^{||0} - \alpha_5^{||0})c_2} = \\ = 1 - 10 Z_{AA}^{||0(12)}(0). \end{aligned} \quad (29)$$

Поскольку процесс упорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы выполняется вблизи точки разупорядочения, где  $Z_{AA}^{(12)}(0) \approx 10^{-1}$ , то параметр разупорядочения со временем изменяется по закону

$$\Delta\eta(t) = 1 - \eta(t) = 10Z_{AA}^{(12)}(0)e^{-\left(\frac{t}{\tau_{pi}}\right)}, \quad (30)$$

то есть  $\eta(t) = 1 - e^{-\left(\frac{t}{\tau_{pi}}\right)}$ .

График зависимости параметра дальнего порядка от времени показан на рис. 3.

Средняя скорость кристаллизации 50 % двухкомпонентных металлических расплавов в модели ПДЗ в приведенном виде (после деления на частоту колебаний мономеров роста в кристаллической двухкомпонентной фазе

$v$ ), то есть  $\bar{V}(t) = \left[ \frac{V(t)}{v} \right]$ , как функция времени в диффузионно-релаксационном режиме имеет вид:

$$\bar{V}(t) = \sum_{i=1}^{n_0} \bar{V}_i(t),$$

$$\bar{V}_i(t) = \left\{ \frac{2 \left[ R_1 + R\lambda^{N-1} (1 + \lambda^{N-1}) \right]}{1 + \lambda^{N-1} + \lambda^{2N-1}} - \lambda^{N-1} (1 + \lambda^{N-1}) \sum_{\alpha,\beta} S_{2\alpha\beta}^{(12)} Z_{\alpha\beta}^{(12)}(0) - \sum_{\alpha,\beta} S_{3\alpha\beta}^{(12)} Z_{\alpha\beta}^{(12)}(0) \right\} e^{-\left(\frac{t}{\tau_{pi}}\right)}. \quad (31)$$

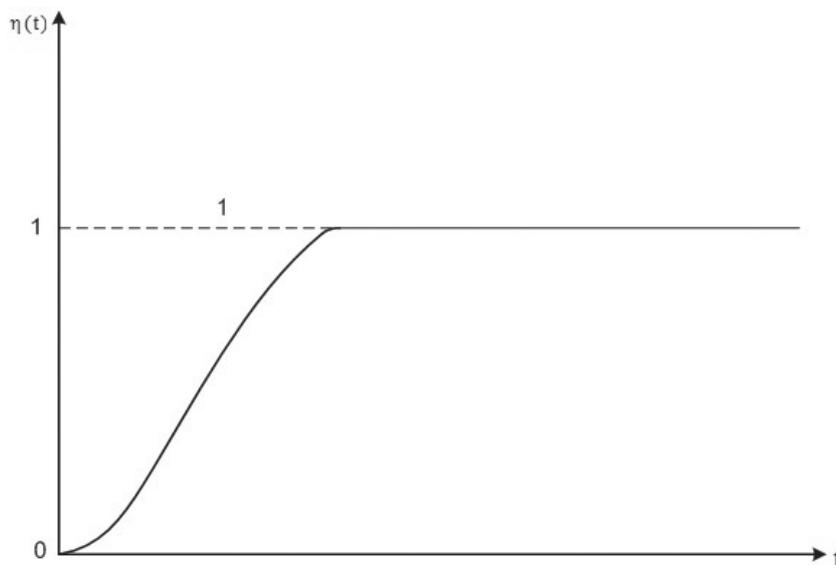
Если ввести для  $i$ -ой компоненты ( $i = 1, 2, \dots, n_0$ ) средней приведенной скорости роста ПДЗ в начальный момент времени  $t = 0$  величину  $\bar{V}_i(0)[\eta]$ , как функцию параметра дальнего порядка « $\eta$ » через функции  $Z_{\alpha\beta}^{(12)}(0)$  и функциональные коэффициенты  $\lambda(\eta)$ ,  $S_{p\alpha\beta}^{(12)}(\eta)$ , где  $\alpha, \beta = A, B$ ;  $p = 2, 3$ , и выражаемую в виде:

$$\bar{V}_i(0)[\eta] = \frac{2 \left[ R_1 + R\lambda^{N-1} (1 + \lambda^{N-1}) \right]}{1 + \lambda^{N-1} + \lambda^{2N-1}} - \lambda^{N-1} (1 + \lambda^{N-1}) \sum_{\alpha,\beta} S_{2\alpha\beta}^{(12)}(\eta) Z_{\alpha\beta}^{(12)}[\eta] - \sum_{\alpha,\beta} S_{3\alpha\beta}^{(12)}(\eta) Z_{\alpha\beta}^{(12)}[\eta], \quad (32)$$

то в окрестности точки разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической решеткой и стехиометрического состава имеем следующие формулы:

$$\bar{V}_i(0)[\eta] = \begin{cases} 0.8R_1 + 1.2R - \frac{3.6q_1^{m+2}R}{4R_1 - R} & \text{при } q_1 \leq q_{1k}; \\ 0.8R_1 + 1.2R - \frac{3.6q_1^{m+2}R}{4R_1 - R} + 2.88q_1^{m+2}c_1 [1 + (m-1)\ln q_1] \eta^2 & \text{при } q_1 > q_{1k}. \end{cases} \quad (33)$$

Из формул (33) видно, что в точке полного разупорядочения



**Рис. 3.** Зависимость параметра дальнего порядка от времени  $\eta(t)$  в диффузионно-релаксационном режиме кристаллизации 50% двухкомпонентных металлических расплавов

**[Fig. 3.** The time far-order  $\eta(t)$  – parameter dependence in diffusive – relaxation procedure for the 50% binary metallic melts]

$$q_{1k} = \left( \frac{1}{16v^2\tau_{pi}^2} \right),$$

зависящей от времени релаксации  $\tau_{pi}$ , средняя приведенная скорость кристаллизации в начальный момент времени испытывает скачок на величину, пропорциональную  $\eta^2$ . Этот результат с новыми константами повторяет данные по кинетике кристаллизации в бездиффузионном (кинетическом) режиме, опубликованные в работах [1, 7].

В окрестности точки полного упорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической ячейкой и стехиометрического состава, где фигурирует параметр разупорядочения  $\Delta\eta(t) = 1 - \eta(t)$ , средняя приведенная скорость роста ПДЗ в начальный момент времени испытывает аналогичную особенность (скачок на величину, пропорциональную  $[\Delta\eta(t)]^2$ ), что следует из формул:

$$\bar{V}_i(0)[\Delta\eta] = \begin{cases} \left. \begin{aligned} &0.8R_1 - 1.2R - 3.2q_1^3(1 + 0.7q_1) \\ &\quad \text{при } q_1 = q_{1k} \text{ и } \Delta\eta = 0; \\ &0.8R_1 - 1.2R - 3.2q_1^3(1 + 0.7q_1) + \\ &\quad + \left[ 3 \cdot 10^{-2} \left( 1, 1 \frac{R_1}{R} - 4, 3 \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{55q_1^3(2.7 + 2q_1)h_4}{N(0.8)^{N-4}} \right] (\Delta\eta)^2 \\ &\quad \text{при } q_1 = q_{1k} \text{ и } \Delta\eta \neq 0. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Как видно из формул (34), особенность в кинетике кристаллизации ПДЗ исчезает при достижении времени  $t \gg \tau_{pi}$ . При  $t$  очень больших  $\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{V}_i(t) = 0$  – кристаллизация прекращается, то есть расплав исчезает.

В работах [10–12] были рассмотрены вопросы экспериментальной и прикладной теоретической физики, связанные с эффектами гетероэпитаксии химических веществ, автоэпитаксии полупроводников и кристаллизации 50% двухкомпонентных расплавов. Во всех этих случаях наблюдалось на экспериментах образование некоторой жидкой фазы на поверхности подложек, на которых росли соответствующие кристаллические фазы, толщиной в сотни ангстрем, то есть порядка  $10^{-7}$  м. Эти величины совпадают по порядку величины с размерами ПДЗ, состоящей при числе мономеров роста  $N \sim 10^{23}$  из  $n_0 \sim 100$  монослоев. В работе [12] был определен температурный интервал вблизи температуры кинетического равновесия системы расплав-кристалл  $T_e$ , но большей критической температуры разупорядочения

$T_k$ , то есть  $T_k < T < T_e$ , когда растет исключительно кристалл с полностью упорядоченной структурой ( $\eta = 1$ ). В настоящей работе показано, что подобное образование полностью упорядоченной кристаллической фазы при небольших переохлаждениях возможно при наличии соответствующих времен релаксации  $\tau_{pi}$ , действующих в диффузионно-релаксационном режиме. В этом заключается основная практическая значимость рассмотренной теории кристаллизации.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Процесс кристаллизации двухкомпонентных 50 % металлических расплавов в диффузионно-релаксационном режиме в модели ПДЗ происходит с особенностями в термодинамике и кинетике, меняющимися во времени. В зависимости от времени релаксации, оцениваемом усреднением по всем монослоям ПДЗ с учетом коэффициента диффузии параметров, характеризующих пространственную неоднородность упорядоченности двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической ячейкой и стехиометрического состава, меняется величина переохлаждения двухкомпонентного расплава (температуры ПДЗ), при котором достигается полное разупорядочение двухкомпонентного кристалла. Сам процесс разупорядочения при любом допустимом времени релаксации в окрестности температуры разупорядочения  $T_k$  происходит в соответствии с термодинамическим переходом Брэгга–Вильямса аналогично кристаллизации ПДЗ в кинетическом режиме.

С ростом времени релаксации требуется большее переохлаждение (меньше температура ПДЗ) для реализации полного разупорядочения двухкомпонентной кристаллической фазы с простой кубической элементарной ячейкой. Кинетика кристаллизации 50 % двухкомпонентных металлических расплавов в диффузионно-релаксационном режиме подобна кинетике бездиффузионного (кинетического) режима в окрестности температуры разупорядочения. В окрестности роста упорядоченной кристаллической фазы кинетика роста двухкомпонентного кристалла меняется со временем (исчезает скачок в скорости роста) и обращается в нуль при временах, значительно больших времени релаксации  $\tau_p$ , то есть ПДЗ исчезает со всеми своими структурными и кинетическими характеристиками.

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Саркисов П. Д., Байков Ю. А., Мешалкин В. П. *Математическое моделирование кристаллизации одно- и двухкомпонентных металлических расплавов*. М.: Физматлит, 2003, 378 с.
2. Байков Ю. А., Петров Н. И. Структура переходной двухфазной зоны при кристаллизации двухкомпонентных металлических расплавов // *Известия высших учебных заведений. Физика*, 2014, т. 57(4), с. 35–43.
3. Байков Ю. А., Петров Н. И. Особенности разупорядочения при кристаллизации двухкомпонентных металлических расплавов в модели переходной двухфазной зоны // *Известия высших учебных заведений. Физика*, 2014, т. 57(5), с. 32–34.
4. Петров Н. И. *Исследование процессов разупорядочения кристаллов при их росте из двухкомпонентных металлических расплавов*. Дис. ... канд. физ.-мат наук. Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС». Москва, 2017. 180 с. URL: [http://misis.ru/files/6902/Petrov\\_AR.pdf](http://misis.ru/files/6902/Petrov_AR.pdf)
5. Саркисов П. Д., Байков Ю. А., Мешалкин В. П. Процессы разупорядочения в кристаллах при кристаллизации двойных металлических расплавов // *ДАН*, 2003, т. 390(6), с. 763–768.
6. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A., Schneider H. G., Ruth V. The order-disorder transformation at supercooled melt/crystal transition region of binary melts (I) the master equation // *Crystal Research and Technology*, 1985, v. 20(8), pp. 1007–1014. DOI: 10.1002/crat.2170200802
7. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A., Schneider H. G., Ruth V. The order-disorder transformation at supercooled melt/crystal transition region of binary melts (II) the steady state solution // *Crystal Research and Technology*, 1985, v. 20(9), pp. 1149–1156. DOI: 10.1002/crat.2170200903
8. Guinier A. J., Griffoul R. *Compte Rendu*, 1945, v. 221, pp. 121.
9. Guinier A. J. Imperfections of crystal lattices as investigated by the study of X-ray diffuse scattering // *Proceedings of the Physical Society*, 1945, v. 57(4), pp. 310–324. DOI: 10.1088/0959-5309/57/4/306
10. Schneider H. G. *Collection: Advances in Epitaxy and Endotaxy*. Akademiai Kiado, Budapest, 1976, p. 23.
11. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A. *Collection: Advances in Epitaxy and Endotaxy*. Akademiai Kiado, Budapest, 1976, p. 159.
12. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A. *Collection: Advances in Epitaxy and Endotaxy*. Akademiai Kiado, Budapest, 1976, p. 257.

UDC 669.017.3:536.421.4

DOI: <https://doi.org/10.17308/kcmf.2019.21/755>

Received 30.11.2018

Accepted 15.05.2019

## THE BINARY 50 % METALLIC MELTS' MICRO CRYSTALLIZATION PECULIARITIES IN DIPHASE TRANSITIONAL ZONE MODEL (DTZ) WITHIN A DIFFUSIVE-RELAXATION PROCEDURE

© 2019 Yu. A. Baikov<sup>1</sup>, N. I. Petrov<sup>1</sup>✉, M. I. Timoshina<sup>2</sup>, E. V. Akimov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia  
9, Miusskaya sq., 125047 Moscow, Russian Federation*

<sup>2</sup>*Moscow Technical University of Communications and Informatics  
8a, Aviamotornaya str., 111024 Moscow, Russian Federation*

### Abstract

**Purpose.** Consider in the diffusion-relaxation procedure micro crystallization of binary 50 % of metallic melts. Earlier in the well-known experimental works there has been established the Ag–Au alloy disordering when crystallizing from the proper metallic melt. It confirmed the possibility of binary metallic crystal disordering presented in given article.

**Methods and methodology.** When using so-called the diphase transitional zone there have been estimated some thermodynamic parameters at which a completely disordered binary crystalline phase characterized by simple cubic lattice and stoichiometric composition could be expected.

✉ Petrov Nikolai I., e-mail: [nik\\_petrov@mail.ru](mailto:nik_petrov@mail.ru)

**Results.** In the vicinity of disordering point given binary crystalline phase has been studied. There has been established a physical law according to which some far order parameter tended to zero in a continuous way. A thermodynamic parameter describing the binary crystalline phase disordering has been estimated. There have been analyzed some crystalline phase kinetic peculiarities in the vicinity of disordering point. The completely disordered binary crystalline phase reconstruction law has been analyzed as the time function. The disorder-order process relaxation periods have been established in the case of simple cubic lattice binary crystalline phase investigated. Moreover, there have been analyzed some kinetic peculiarities connected with completely ordered and disordered binary crystals.

**Conclusions.** It was known within the temperature interval  $T_k < T < T_e$ , where  $T_k$  – crystalline phase disordering temperature,  $T_e$  – the melt-crystal kinetic equilibrium one usually the completely ordered binary crystalline phase was observed. This effect can be realized only in the diffusive-relaxation procedure.

**Keywords:** diphasе transitional zone, a growth monomer concentration, a far-order parameter in binary cubic simple lattice, the metallic melts' crystallization rate.

### CONFLICT OF INTEREST

The authors declare the absence of obvious and potential conflicts of interest related to the publication of this article.

### REFERENCES

1. Sarkisov P. D., Baikov Yu. A., Meshalkin V. P. *Matematicheskoe modelirovanie kristallizatsii odno- i dvukhkomponentnykh metallicheskih rasplavov* [The one- and binary metallic melts mathematical modeling crystallization]. Moscow, Physmatlit Publ., 2003. 378 p. (in Russ.)
2. Baikov Y. A., Petrov N. I. Structure of the Transitive Two-Phase Zone in Crystallization of Two-Component Metal Melts. *Russian Physics Journal*, 2014, v. 57(4), pp. 459–468. DOI: 10.1007/s11182-014-0262-2
3. Baikov Yu. A., Petrov N. I. Special Features of disordering in Crystallization of Two-Component Metal Melts in the Model of Two-Phase Transitive Zone. *Russian Physics Journal*, 2014, v. 57(5), pp. 598–614. DOI: 10.1007/s11182-014-0282-y
4. Petrov N. I. *The Crystal Disordering Study When Growing From the Binary Metallic Melts*. National University of Science and Technology «MISiS» Dis. Cand. Phys.-Mat. Sci. Moscow, 2017, 180 p. URL: [http://misis.ru/files/6902/Petrov\\_AR.pdf](http://misis.ru/files/6902/Petrov_AR.pdf) (in Russ.)
5. Sarkisov P. D., Baikov Yu. A., Meshalkin V. P. Order-disorder processes in crystals when crystallizing binary metallic melts. *Doklady Physics*, 2003, v. 48(6), pp. 290–295. DOI: 10.1134/1.1591316
6. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A., Schneider H. G., Ruth V. The order-disorder transformation at supercooled melt/crystal transition region of binary melts (I) the master equation. *Crystal Research and Technology*, 1985, v. 20(8), pp. 1007–1014. DOI: 10.1002/crat.2170200802
7. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A., Schneider H. G., Ruth V. The order-disorder transformation at supercooled melt/crystal transition region of binary melts (II) the steady state solution. *Crystal Research and Technology*, 1985, v. 20(9), pp. 1149–1156. DOI: 10.1002/crat.2170200903
8. Guinier A. J., Griffoul R. *Compte Rendu*, 1945, v. 221, pp. 121.
9. Guinier A. J. Imperfections of crystal lattices as investigated by the study of X-ray diffuse scattering. *Proceedings of the Physical Society*, 1945, v. 57(4), pp. 310–324. DOI: 10.1088/0959-5309/57/4/306
10. Schneider H. G. *Collection: Advances in Epitaxy and Endotaxy*. Akademiai Kiado, Budapest, 1976, p. 23.
11. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A. *Collection: Advances in Epitaxy and Endotaxy*. Akademiai Kiado, Budapest, 1976, p. 159.
12. Chistyakov Yu. D., Baikov Yu. A. *Collection: Advances in Epitaxy and Endotaxy*. Akademiai Kiado, Budapest, 1976, p. 257.

---

Байков Юрий Алексеевич – д. ф.- м. н., профессор, кафедра физики, Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия; e-mail: [nik\\_petrov@mail.ru](mailto:nik_petrov@mail.ru). ORCID iD 0000-0003-3890-2838.

Baikov Yury A. – Dr. Sci (Phys.-Math), Full Professor, Physics Department, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation; e-mail: [nik\\_petrov@mail.ru](mailto:nik_petrov@mail.ru). ORCID iD 0000-0003-3890-2838.

*Петров Николай Иванович* – к. ф.-м. н., доцент, кафедра физики, Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева, Москва, Россия; e-mail: [nik\\_petrov@mail.ru](mailto:nik_petrov@mail.ru). ORCID iD 0000-0002-5360-0806.

*Тимошина Маргарита Игоревна* – к. т. н., доцент, кафедра физики, Московский технический университет связи и информатики, Москва, Россия; e-mail: [ritatoo@rambler.ru](mailto:ritatoo@rambler.ru). ORCID iD 0000-0001-8954-0473.

*Акимов Евгений Владимирович* – ассистент, кафедра физики, Московский технический университет связи и информатики, Москва, Россия; e-mail: [akimovmtuci@mail.ru](mailto:akimovmtuci@mail.ru). ORCID iD 0000-0001-6339-3495.

*Petrov Nikolai I.* – Cand. Sci (Phys.-Math) Associate Professor, Physics Department, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian Federation; e-mail: [nik\\_petrov@mail.ru](mailto:nik_petrov@mail.ru). ORCID iD 0000-0002-5360-0806.

*Timoshina Margorita I.* – Cand. Sci (Tech.) Associate Professor, Physics Department, Moscow Technical University of Communications and Informatics, Moscow, Russian Federation; e-mail: [ritatoo@rambler.ru](mailto:ritatoo@rambler.ru). ORCID iD 0000-0001-8954-0473.

*Akimov Evgeniy V.* – Lecturer, Physics Department, Moscow Technical University of Communications and Informatics, Moscow, Russian Federation; e-mail: [akimovmtuci@mail.ru](mailto:akimovmtuci@mail.ru). ORCID iD 0000-0001-6339-3495.