

01.08.15

Очистка мелких зерен кристаллитов аморфного сплава от примесей, дефектов и неравновесных квазичастиц

© С.В. Терехов

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина,
Донецк, Россия

E-mail: svlter@yandex.ru

Поступила в Редакцию 26 марта 2024 г.

В окончательной редакции 26 марта 2024 г.

Принята к публикации 29 марта 2024 г.

Рассмотрены термодинамические аспекты очистки мелкого зерна кристаллической фазы аморфного сплава от посторонних компонентов, адсорбционная емкость границы кристаллита и влияние типа примеси на формирование нового слоя для фрактального и топологического изменения внутренней энергии атомов на межфазной поверхности. Определены условия очистки мелкого зерна для идеальных и взаимодействующих фаз аморфного сплава. Показано, что положительность энергии смешения фаз способствует возникновению островков из однотипных частиц. Изменение химического состава формирующейся кристаллической оболочки и поверхностная активность примесей могут являться причиной возникновения слоистых структур.

Ключевые слова: сферическое мелкое зерно, неравновесность, адсорбция, сегрегация примесей, поверхностное натяжение.

DOI: 10.61011/FTT.2024.04.57785.69

1. Введение

Аморфные, иерархически структурированные и другие подобные сплавы относятся к неравновесным системам, в которых могут формироваться локально-равновесные области. Явления и процессы на внешних и внутренних границах областей оказывают существенное влияние на служебные характеристики материалов и изделий из них. В частности, накопление примесей [1–5]:

- изменяет механические и электромагнитные свойства [6–9] наноструктурированных [1,3] и k -компонентных [2,4] сплавов;

- ухудшает характеристики материалов, подвергшихся воздействию радиационного облучения [5];

- снижает эксплуатационные свойства механизмов [10,11];

- способствует измельчению зерна при интенсивной пластической деформации [12,13] или возникновению фазовой неустойчивости [14].

При аналитическом описании процесса поверхностной диффузии посторонних атомов используют разнообразные подходы [15–20]. Например, при изучении биметаллических наночастиц [20] было показано образование наноструктуры типа „ядро-оболочка“, когда один из компонентов вытесняется на поверхность наночастицы. Отметим, что к поверхности перемещается компонент, характеризующийся более низким значением поверхностного натяжения. Проблематичность описания формирования и стабильности подобных структур связана с их неравновесностью.

В работе [21] с использованием модели субрегулярных растворов был предложен новый вывод уравнения

Батлера [22]. Для ядра наночастицы в виде неограниченного источника примеси проведена оценка сегрегации в поликристаллических зернах с размером до 100 нм. Аналогичную задачу необходимо решать для сферического зародыша кристаллической фазы в аморфной среде, но с ограниченным источником посторонних атомов. Отметим, что сочетание атомистического и термодинамического подходов при численном моделировании системы Au–Ag [23] предсказывает эффект образования слоистой структуры, слабо выраженной внутри ядра и ярко проявляющейся на его поверхности. Кроме того, необходимо отличать сегрегационный слой от прослойки новой фазы, зарождающейся на границе наночастицы [19]. С течением времени прослойка увеличивается в размерах, а толщина сегрегационной оболочки достигает постоянного порогового значения. Оно обусловлено локальными изменениями свойств сплава на межфазной границе.

При перемещении примесной частицы по поверхности кристаллита наблюдают аномальную кинетику роста зародыша новой фазы из-за понижения характеристической энергии системы (эффект Вейсмюллера [24]). В чистом металле суммарная энергия межзеренных границ уменьшается за счет поглощения крупными зернами более мелких. Наличие примесей может привести к обнулению энергии границы за счет сегрегации неосновных компонентов, что приводит к стабилизации размера зерна [13,25,26]. Если размер зерна уменьшается, то происходит снижение концентрации примеси на межфазной границе [17].

В k -компонентных сплавах посторонние атомы различаются коэффициентами диффузии и энергиями се-

грегации, поэтому кинетика вытеснения примесей на границы зерен может стать существенно немонотонной. Это связано с тем, что коэффициент диффузии примеси по границе значительно превышает его значение в объеме фазы [20]. В случае бинарных сплавов сегрегация примеси в зернах с размером не менее определенной критической величины приводит к идеальной очистке объема зерна от неосновного компонента даже при достаточно низких температурах [27].

Снижение концентрации примеси на границе мелких зерен хорошо описывается в рамках модели регулярного раствора [20,28]. Если сегрегирующие атомы взаимодействуют между собой, то измельчение зерна вызывает на его границе смещение фазового перехода в сторону более низких температур [29]. Измельчение зерен до размеров наномасштаба за счет интенсивной пластической деформации порождает большое число неравновесных границ, что препятствует дальнейшему измельчению зерна [20] и увеличивает сегрегационную емкость сплава [27]. Отметим, что расширение сегрегационного слоя стабилизирует неравновесные границы зерен [20].

Процессы на межфазной границе растущего зерна включают в себя:

- формирование нового слоя зародыша за счет диффузионного подвода атомов из неограниченной аморфной матрицы;
- адсорбцию-десорбцию частиц;
- вытеснение на границу посторонних атомов и квазичастиц из объема зерна;
- диффузионное блуждание адатомов;
- фрактальность энергетического ландшафта границы и т.д.

В связи с изложенной проблематикой целью данной работы является определение термодинамических свойств сферического зародыша кристаллической фазы и его границы в аморфном сплаве, выяснение роли адсорбции и типа компонентов системы на формирование межфазной поверхности.

2. Неравновесные состояния и очистка мелких зерен

Бинарные аморфные сплавы являются наиболее подходящими объектами для выяснения закономерностей явлений и процессов в неупорядоченной среде в силу своей малокомпонентности. Внешнее воздействие (изотермический отжиг [30], интенсивная пластическая деформация [31] и другие) на такой сплав вызывают его кристаллизацию с образованием устойчивых сферических зародышей при превышении их радиусом определенного порогового значения. Однако межфазная поверхность кристаллитов неустойчива и неравновесна, так как на нее из объема зародыша вытесняются различного рода неоднородности, дефекты, примесные атомы.

Выделим три неравновесных состояния зерна:

1) слабонеравновесное (линейные связи между термодинамическими величинами) — согласно Пригожину [32] система может аппроксимироваться совокупностью локально-равновесных областей. В них термодинамические характеристики зависят от пространственно-временных аргументов, а потенциалы термодинамических полей плавно изменяются при переходе от области к области;

2) сильнонеравновесное (нелинейные связи между термодинамическими величинами) — нарушается даже локальная эргодичность [33], описание состояния возможно только с использованием нелинейных кинетических уравнений;

3) далекие от термодинамического равновесия состояния — помимо разнообразных потоков возникают течения как вдоль границы, так и поперек ее с образованием диссипативных структур [34]. Для моделирования явлений и процессов необходимо использовать кинетико-динамический подход.

Мелкие зерна кристаллической фазы занимают малые области, которые достаточно быстро достигают локального равновесия. Так как принцип Пригожина применим для слабонеравновесного состояния сферического зародыша кристаллической фазы в неограниченной аморфной среде, то рассмотрим квазисистему из 4 идеальных фаз с объемными долями x_i ($i = 1-4$): упорядочивающейся (фаза 1), примесной (фаза 2), „фазы пустоты“ [33] (фаза 3), состоящей из кавитонов [34] (от итал. „cavità“ — пустота, пустотность) и аморфной материнской (фаза 4). Компонентами фаз являются субэлементы, например, для кристаллической фазы таковыми принимаются зерна кристаллитов.

Фаза 1 формируется атомами кристаллизующегося компонента и содержит малое количество вытесняемых на межфазную поверхность примесей, точечных дефектов, неравновесных неоднородностей и кавитонов. Фаза 2 образована совокупностью примесных атомов и несовершенств кристаллической решетки. Фаза 3, в основном, состоит из кавитонов, объемная доля и число которых значительно превышает аналогичные величины атомов. Фаза 4 представляет собой аналог „замороженной“ жидкости, в которой число кавитонов сопоставимо с числом атомов, поэтому область находится в неупорядоченном состоянии. Объемные доли фаз x_i ($i = 1-4$) связаны очевидным соотношением

$$\sum_{i=1}^4 x_i = 1, \quad (1)$$

Для описания термодинамических свойств зерна воспользуемся ячеечным подходом, как и в [35]. Объем кристаллита разбивается на различающиеся по размерам ячейки, в каждой из которых располагается один из субэлементов той или иной фазы. Такой подход приводит к тому, что система будет плотно упакована атомами, квазичастицами и кавитонами. Для идеальных фаз (фазы

не взаимодействуют между собой) химические потенциалы μ_i их субэлементов определяются формулами

$$\mu_i(P, T, t) = \mu_{i0}(P, T, t) + \beta^{-1} \ln x_i(T, t), \quad (2)$$

$\mu_{i0}(P, T, t)$ — стандартные значения химических потенциалов для каждой из фаз, P — давление, T — температура, k_B — постоянная Больцмана, $\beta = (k_B T)^{-1}$. Независимость величин (2) от пространственной переменной означает, что фазы считаются изотропными и однородными.

Исключив из рассмотрения объемную долю фазы 1 с помощью (1) и используя (2), получим для плотности энергии Гиббса выражение

$$g = \sum_{i=1}^4 \mu_i x_i = h - sT, \quad (3)$$

где

$$h = g_1 + \sum_{i=1}^4 g_i x_i$$

— плотность энергии Гельмгольца,

$$g_1 = \mu_{01}, \quad g_i = \mu_{0i} - \mu_{01} \quad (i = 2 \dots 4), \quad s = -k_B \sum_{i=1}^4 x_i \ln x_i$$

— плотность энтропии. Очистка мелких зерен кристаллической фазы происходит при достижении характеристической функцией (3) минимума по аргументам $i = 2 \dots 4$. Другими словами, реакции вытеснения фаз $i = 2 \dots 4$ из мелкого кристаллита происходят при достижении равенств

$$x_i/x_1 = \exp(-\beta g_i) = K(P, T). \quad (4)$$

Из (4) видно, что увеличение значений величин g_i ведет к уменьшению объемных долей фаз $i = 2-4$ в мелком зерне. С химической точки зрения равенство (4) описывает реакцию вытеснения субэлементов фазы i ($i = 2 \dots 4$) из мелкого зерна кристаллической фазы. Величина $K(P, T)$ определяет константу реакции при заданных значениях давления P и температуры T .

3. Взаимодействие фаз и переход неоднородностей на границу

Известно, что значительное число случайных величин подчиняются нормальному распределению (закону Гаусса–Лапласа [36]), дискретным аналогом которого является распределение Бернулли. Предположим, что вероятность p_i того, что субэлемент фазы i имеет энергию ε_i , описывается формулой Больцмана

$$p_i = \exp(-\beta \varepsilon_i). \quad (5)$$

Тогда вероятность W размещения субэлементов фаз по ячейкам с учетом перестановок N_i ($i = 1 \dots 4$) тождественных субэлементов одного сорта вычисляется по теореме Бернулли [36]

$$W = \left(N! \prod_{i=1}^4 p_i^{N_i} \right) / \prod_{i=1}^4 N_i!, \quad (6)$$

здесь $N = \sum_{i=1}^4 N_i$. Плотность свободной энергии f зерна из расчета на один субэлемент равна

$$f = -(\theta \ln W)/(VN) \\ = \sum_{i=1}^4 \varepsilon_i x_i + \theta \sum_{i=1}^4 x_i \ln x_i = u - sT, \quad (7)$$

где V — объем системы, $x_i = N_i/N$, $\theta = k_B T$, $u = \sum_{i=1}^3 \varepsilon_i x_i$ — внутренняя энергия. В зависимости от вида функций ε_i полученные соотношения могут описывать: регулярный раствор (учитываются только парные взаимодействия фаз), субрегулярную систему (функции ε_i зависят не только от парных, но и тройных взаимодействий) [37–39] и т.д. В случае регулярного раствора химические потенциалы субэлементов фаз (2) равны

$$\mu_i = (\partial f / \partial x_i)_{V, T, x_j \neq x_i} = \mu_{i0} + \sum_{j=1}^4 Q_{ij} x_j + k_B T \ln x_i, \quad (8)$$

где Q_{ij} — усредненные по объему системы части дальнедействующих потенциалов взаимодействия фаз. С учетом равенств (1) и (8) плотность энергии Гиббса (3) достигает экстремума по переменной x_k ($k = 2 \dots 4$) при выполнении соотношения

$$\mu_1 + Q_{1k} x_1 = \mu_k + Q_k x_k, \quad (9)$$

где $Q_1 = Q_{11} - Q_{1k}$, $Q_k = Q_{kk} - Q_{k1}$. Соотношение (9) определяет в неявном виде зависимость объемной доли x_k ($k = 2 \dots 4$) от давления P , температуры T и объемной доли x_1 кристаллической фазы 1. Продифференцировав (9) по x_k ($k = 2 \dots 4$), получим с учетом симметричного соотношения $Q_{1k} = Q_{k1}$

$$\partial(\mu_1 - \mu_k) / \partial x_k = 2E_{1k}, \quad (10)$$

где $2E_{1k} = Q_1 + Q_k$ — энергия смешения фаз 1 и k .

В работе [40] показано, что при положительности энергии смешения двух сосуществующих фаз наблюдается восходящая диффузия. Это означает, что при некоторых условиях коэффициент взаимной диффузии принимает отрицательные значения, и частицы одного вида стремятся собраться в одном месте. Следовательно, если примесь, дефект или неравновесная квазичастица вытесняется из мелкого зерна на его границу, то и аналогичные субэлементы оказываются в их окружении, поэтому мелкое зерно очищается.

4. Адсорбционная емкость границы

Рассмотрим одну наносферу растущего зародыша кристаллической фазы. Так как ее объем разделен на ячейки, то и граничная поверхность представляет собой L посадочных мест с площадями a_i ($i = 1 \dots 4$). Отметим, что адсорбция кавитона на поверхность наносферы эквивалентна десорбции любого другого субэлемента с границы, общее число которых обозначим через L , а число субэлементов того или иного сорта системы — L_i ($i = 1 \dots 4$). Тогда справедливы равенства

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^4 L_i = L \\ \sum_{i=1}^4 a_i L_i = aL = A \end{cases}, \quad (11)$$

где $A = 4\pi r^2$ — площадь сферической поверхности, r — радиус зародыша, величины $a_i L_i = A_i$ задают площади границы, занятые компонентом i . Из (11) легко найти, что

$$L_4 = \frac{A - a_p L_p}{a_4}, \quad L = \frac{A - (a_p - a_4)L_p}{a_4}, \quad (12)$$

где

$$L_p = \sum_{i=1}^3 L_i, \quad a_p L_p = \sum_{i=1}^3 a_i L_i, \quad a_p = \sum_{i=1}^3 a_i C_i,$$

концентрации $C_i = L_i/L_p$ субэлементов фаз $1 \dots 3$ связаны с эффективными концентрациями компонентов равенствами $C_i = c_i/c_p$ ($i = 1 \dots 3$), $c_p = L_p/L$.

Разделив все уравнения (11) на L , получим равенства

$$\begin{cases} c_p + c_4 = 1 \\ a_p c_p + a_4 c_4 = \Gamma^{-1} \end{cases}, \quad (13)$$

здесь $\Gamma = L/A$ — адсорбционная емкость границы. Если же разделить все равенства (11) на площадь границы A , то система (11) примет вид

$$\begin{cases} \Gamma_p + \Gamma_4 = \Gamma \\ \sum_{i=1}^3 a_i \Gamma_i + a_4 \Gamma_4 = 1 \end{cases}, \quad (14)$$

где $\Gamma_i = L_i/A$ ($i = 1 \dots 3$) — адсорбция субэлементов фаз, $\Gamma_p = \sum_{i=1}^3 \Gamma_i$. Из (13) и (14) находим

$$\Gamma = [a_p c_p + a_4(1 - c_p)]^{-1};$$

$$\Gamma_i = c_i \Gamma (i = 1 \dots 3); \quad \Gamma_p = c_p \Gamma; \quad \Gamma_4 = (1 - c_p) \Gamma. \quad (15)$$

Из (15) видно, что адсорбционная емкость границы Γ определяет адсорбцию по Ленгмюру всех компонентов квазисистемы фаз. Например, адсорбция атомов, точечных дефектов и неравновесных квазичастиц (кроме кавитонов) определяется формулой изотермы Ленгмюра (рис. 1)

$$\Gamma_p/\Gamma_{p0} = K c_p [1 + (K - 1)c_p]^{-1}, \quad (16)$$

где величины $\Gamma_{p0} = a_p^{-1}$, $K = a_p/a_4$.

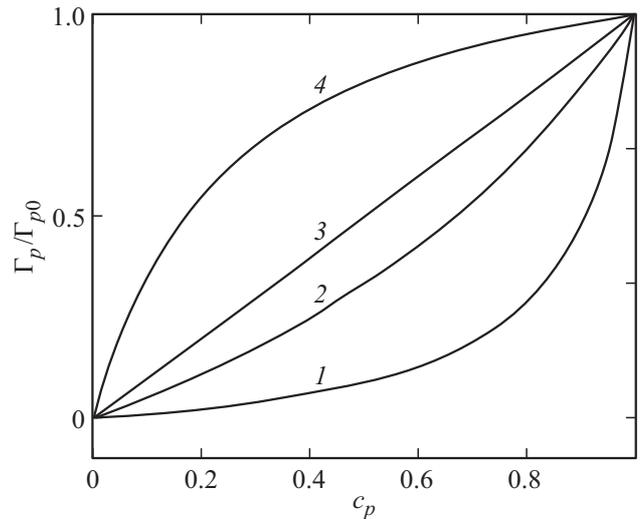


Рис. 1. Изотермы адсорбции Ленгмюра при различных значениях параметра K : 1 — 0.1; 2 — 0.5; 3 — 1.0; 4 — 5.0.

При малой концентрации адсорбированных атомов и квазичастиц ($c_p \ll 1$) и положительной энергии смешения адатомов, когда каждый из них стремится окружить себя подобными соседями, нарастающий кристаллический слой представляет собой агломераты (островки). При отрицательной энергии смешения частицы хаотически располагаются по сфере. Если концентрация атомов и квазичастиц близка к единице, то слой практически покрывает всю сферу зародыша, после заполнения которого начинается рост нового слоя. В рассмотренных случаях поверхностная диффузия вынуждает адсорбированные частицы присоединяться к островку или занимать энергетически более выгодные положения. Таким образом, несмотря на знак энергии смешения адатомов, кристаллический зародыш увеличивается в размерах по механизму послойного роста. Превышение размера мелкого зерна некоторого порогового значения может привести к изменению химического и фазового составов кристаллизующихся слоев, т.е. может образоваться слоистая структура.

5. Влияние частиц на поверхностное натяжение

Причиной ее зарождения также может служить влияние примесей и неравновесных квазичастиц на поверхностное натяжение слоя. Примесные атомы могут относиться к классу поверхностно-активных (ПАВ), поверхностно-нейтральных (ПНВ) или поверхностно-инактивных (ПИВ) веществ. Частицы первого сорта понижают, второго — не изменяют, третьего — повышают поверхностное натяжение границы мелкого зерна.

Рост сферического кристаллита может сопровождаться образованием нового моноатомного слоя с фрактальной или топологической размерностью. Так как на

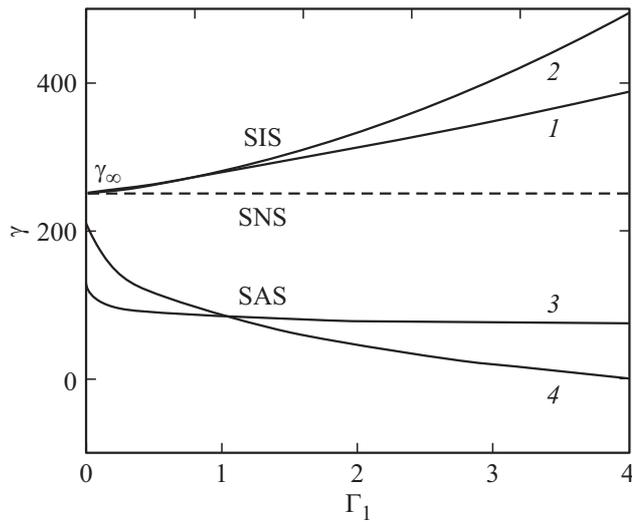


Рис. 2. Зависимость поверхностного натяжения границы γ от адсорбции частиц Γ_1 при значениях параметров $W = -30$, d : 1 — 1.1, 2 — 1.5; $W = 165$, d : 3 — 0.05, 4 — 0.3.

граничную поверхность из ядра мелкого зерна вытесняются элементы фазы 2, а из фазы 4 адсорбируются элементы фаз 1 и 2, то фазы 1 и 2 можно рассматривать как объединенный источник атомов кристаллизующегося вещества, примесей, дефектов и неравновесных квазичастиц. Рассмотрим в рамках ячеечного подхода (см. пункт 3) систему с взаимодействием N_1 субэлементов объединенных фаз 1 и 2, значительно превышающим взаимодействия N_2 субэлементов двух других объединенных фаз 3 и 4. Кроме того, учтем энергетическую фрактальность границы, т.е. внутреннюю энергию субэлементов объединенной фазы запишем в виде

$$\varepsilon_1 = Q_{11}(\Gamma_1)^{d-1}/2, \quad (17)$$

где Q_{11} — энергетический параметр взаимодействия субэлементов объединенной фазы, осажденных на границу, Γ_1 — суммарная адсорбция атомов, примесей, дефектов и неравновесных квазичастиц на границе, d — фрактальный коэффициент подобия. Приращение свободной энергии нового слоя кристаллической фазы запишем в виде

$$F_A = \gamma_\infty A + \varepsilon_1 N_1 + \Delta\theta \left[N_1 \ln\left(\frac{N_1}{N}\right) + N_2 \ln\left(\frac{N_2}{N}\right) \right], \quad (18)$$

γ_∞ — поверхностное натяжение при создании геометрической поверхности на бесконечности, $\Delta\theta = k_B \Delta T = k_B(T - T_c)$, T_c — температура кристаллизации. Поверхностное натяжение равно (рис. 2)

$$\gamma = (\partial F_A / \partial A)_{N_1, T} = \gamma_\infty - 0.5 Q_{11} (d-1) (\Gamma_1)^d + (\Delta\theta/a_2) \ln[(1 - a_1 \Gamma_1)/(1 + (a_2 - a_1) \Gamma_1)], \quad (19)$$

Из рис. 2 видно, что при значении параметра $W = 0.5 Q_{11} (d-1) > 0$ и показателе степени $d < 1$ кривые описывают ПАВ, а при $W = 0.5 Q_{11} (d-1) < 0$ и $d > 1$ — ПИВ (параметры $\gamma_\infty = 250$ и $Z = \Delta\theta/a_2 = -0.1$).

Если поверхность сферического зерна топологическая и находится в слабонерновесном состоянии, то к ней можно применить принцип локального равновесия. Запишем внутреннюю энергию U границы в виде [41]

$$U = \gamma A + S_A T + \mu L_p, \quad (20)$$

где γ — поверхностное натяжение, S_A — энтропия межфазной границы, L_p — количество частиц и квазичастиц, размещенных на границе. Внутренняя энергия на единицу площади равна

$$u(s, \Gamma_p) = \gamma - iT + \mu \Gamma_p, \quad (21)$$

здесь $i = -S_A/A$ — термодинамическая информация. Вычислив бесконечно малое изменение свободной энергии (21) и учитывая ее аддитивность, получим согласно соотношению Гиббса–Дюгема для дифференциала поверхностного натяжения выражение

$$d\gamma = iT - \Gamma_p d\mu. \quad (22)$$

С другой стороны, бесконечно малое изменение поверхностного натяжения по формуле Лапласа (например, [42, с. 32]; [43, с. 13]) равно

$$d\gamma = (P dr + r dP)/2, \quad (23)$$

при этом дифференциал радиуса наносферы задается равенством

$$dr = (\partial r / \partial T)_P dT + (\partial r / \partial P)_T dP. \quad (24)$$

Найдем из (22–24) выражение для дифференциала химического потенциала частиц на поверхности раздела фаз

$$\begin{aligned} d\mu &= (-d\gamma + iT)/\Gamma_p \\ &= -(2\Gamma_p)^{-1} [r - r_0] dP + (i - i_0) dT = \omega dP - s dT, \end{aligned} \quad (25)$$

где $r_0 = -P(\partial r / \partial P)_T$, $i_0 = (2\Gamma_p)^{-1} P(\partial r / \partial T)_P$, $\omega = -(2\Gamma_p)^{-1} [r - r_0]$ — средний объем, приходящийся на одну частицу, а $-s = i - i_0$ — ее вклад в энтропию границы. Отсюда следует, что характеристика

$$i + s = i_0. \quad (26)$$

При обращении суммы (26) в нуль ($i_0 = 0$) граница находится в динамическом равновесии, а при равенстве правой части константе ($i_0 = \text{const}$) — достигает стационарного состояния. При отрицательности правой части для ПИВ происходит хаотизация частиц на границе, а при ее положительности для ПАВ — их упорядочение. В силу положительности величины $\omega > 0$

частная производная $\partial r/\partial P$ будет принимать разные значения для ПАВ $r < r_0$ ($\Gamma_p > 0$ [42]) и для ПИВ $r > r_0$ ($\Gamma_p < 0$ [42]). По определению объема ω независимость радиуса растущего зародыша от давления возможна только для ПИВ, повышающих поверхностное натяжение.

6. Заключение

Одним из приоритетных направлений современного материаловедения является создание новых сплавов на базе неупорядоченных сред. К ним относятся, в частности, аморфные сплавы с мелкими зернами кристаллической фазы. Их аморфная матрица армируется кристаллитами малых размеров, что позволяет квалифицировать такой материал как композитный. Экспериментальные исследования сплавов с очищенными зернами и их границами демонстрируют улучшение физико-химических характеристик, повышение термической устойчивости и времени эксплуатации изделий из такого материала. Поэтому выяснение термодинамических условий очистки мелких зерен, свойств их граничной поверхности, влияния частиц на поверхностное натяжение являются актуальными задачами. Использование различных моделей связано как с разнообразием механизмов роста на сферическом зерне новых слоев и их составом, так и с геометрией формирующейся границы. В модели идеальных фаз переход примесей, дефектов и неравновесных квазичастиц из ядра мелкого зерна на его границу описывается реакцией вытеснения. Учет взаимодействия субэлементов фаз в рамках ячеечной модели определяет роль энергии смещения при формировании островков из частиц на границе или их хаотического распределения по поверхности зерна. Адсорбционная емкость границы задается изотермой Ленгмюра. Поверхностное натяжение границы зависит как от ее геометрической природы, так и химического состава вновь формирующихся слоев кристаллической фазы.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] С.В. Дивинский, С.М. Захаров, О.А. Шматко. Успехи физики металлов **7**, 1 (2006).
- [2] К.Д. Белашенко, В.Г. Вакс. ЖЭТФ **112**, 2 (8), 714 (1997).
- [3] В.М. Самсонов, И.В. Талызин, А.Ю. Каргошкин, М.В. Самсонов. Физика металлов и металловедение **120**, 6, 630 (2019).
- [4] А.В. Матвеев. Конденсированные среды и межфазные границы **14**, 3, 358 (2012).
- [5] В.В. Слезов, О.А. Осмаев, Р.В. Шаповалов. Вопросы атомной науки и техники **2**, 82 (2007).
- [6] C.Y. Wong, C.R.M. Grovenor, P.E. Batson, D.A. Smith. J. Appl. Phys. **57**, 2, 438 (1985).
- [7] Y. Fujita, K. Kitakizaki, K. Masuda-Jindo. Solid State Phenomena **51–52**, 21 (1996).
- [8] K. Wang, T. Xu, C. Shao, C. Yang. J. Iron Steel Res. **18**, 6, 61 (2011).
- [9] X.F. Zhang, T. Fujita, D. Pan, J.S. Yu, T. Sakurai, M.W. Chen. Mater. Sci. Eng. A **527**, 9, 2297 (2010).
- [10] В.И. Архаров. В кн.: Физика хрупкого разрушения. Наук. думка, Киев (1976). Ч. II. С. 44–57.
- [11] А.В. Васильев, С.Б. Ермаков, В.В. Каргинова. Холодильная техника и кондиционирование **1**, 16 (2009).
- [12] D.L. Beke, C. Cserháti, I.A. Szabó. J. Appl. Phys. **95**, 9, 4996 (2004).
- [13] J.R. Trelewicz, C.A. Schuh. Phys. Rev. B **79**, 9, 094112-1 (2009).
- [14] Б.С. Бокштейн, Ч.В. Копецкий, Л.С. Швиндлерман, А.Н. Орлов, Л.М. Клиггер, Д.А. Горбунов, В.М. Иевлев, Ю.М. Мишин, И.М. Разумовский, С.З. Бокштейн, А.Н. Алешин, С.И. Прокофьев, Б.Б. Страумал, В.Е. Фрадков. Структура и свойства внутренних поверхностей раздела в металлах. Наука, М. (1988).
- [15] Д. Мак Лин. Границы зерен в металлах. Металлургиздат, М. (1960).
- [16] R.H. Fowler, E.A. Guggenheim. Statistical Thermodynamics. University Press, Cambridge (1939). 693 p.
- [17] В.В. Слезов, Л.Н. Давыдов, В.В. Рогожкин. ФТТ **37**, 12, 3565 (1995).
- [18] P.C. Millett, R.P. Selvam, A. Saxena. Acta Mater. **55**, 2329 (2007).
- [19] И.К. Разумов. ФТТ **56**, 4, 749 (2014).
- [20] И.К. Разумов. ЖФХ **88**, 3, 485 (2014).
- [21] G. Kaptay. J. Mater. Science **51**, I.4, 1738 (2016).
- [22] J.A.V. Butler. Proc. Royal Soc. London A **135**, I.827, 348 (1932).
- [23] А.Г. Бембель. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. Тверск. гос. ун-т, Тверь (2017). Вып. 9. С. 81–88.
- [24] J. Weissmuller. Nanostruct. Mater. **3**, 1–6, 261 (1993).
- [25] K.A. Darling, R.N. Chan, P.Z. Wong, J.E. Semones, R.O. Scattergood, C.C. Koch. Scripta Mater. **59**, 5, 530 (2008).
- [26] E. Botcharova, J. Freudenberg, L. Schulz. Acta Mater. **54**, 12, 3333 (2006).
- [27] K. Ishida. J. Alloys Comp. **235**, 2, 244 (1996).
- [28] Дж. Кристиан. Теория превращений в металлах и сплавах. Ч. 1. Термодинамика и общая кинетическая теория. Мир, М. (1978). [J.W. Christian. The theory of transformations in metals and alloys. Part I. Equilibrium and general kinetic theory. Pergamon Press, Oxford (1975)].
- [29] Cs. Cserhati, I.A. Szabo, D.L. Beke. J. Appl. Phys. **83**, 6, 3021 (1998).
- [30] П.С. Попель, В.Е. Сидорова, М. Кальво-Дальборг, У. Дальборг, В.В. Молоканов. Расплавы **3**, 223 (2020).
- [31] Г.Е. Абросимова, А.С. Аронин, С.В. Дობаткин, И.И. Зверькова, Д.В. Матвеев, О.Г. Рыбченко, Е.В. Татьяна. ФТТ **49**, 6, 983 (2007).
- [32] И. Пригожин, Д. Кондепуди. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. Мир, М. (2002). [D. Kondepudi, I. Prigogine. Modern thermodynamics. From heat engines to dissipative structures. John Wiley & Sons, Chichester (1998)].
- [33] S. Stølen, T. Grande. Chemical thermodynamics of materials: macroscopic and microscopic aspects. John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Chichester (2004).

- [34] В. Эбелинг. Образование структур при необратимых процессах. Мир, М. (1979). [W. Ebeling. Eine einföhrung in die theorie dissipativer strukturen. BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig (1976)].
- [33] В.И. Фистуль, В.И. Петровский, Н.С. Рытова, П.М. Гринштейн. Физика и техника полупроводников **13**, 7, 1402 (1979).
- [34] С.В. Терехов, А.И. Лимановский. Физика и техника высоких давлений **28**, 3, 65 (2018).
- [35] С.В. Терехов. Физика и техника высоких давлений **22**, 2, 22 (2012).
- [36] Е.С. Вентцель. Теория вероятностей. Academia, М. (2005).
- [37] А.А. Смирнов. Молекулярно-кинетическая теория металлов. Наука, М. (1966).
- [38] Я.И. Герасимов, В.А. Гейдерих. Термодинамика растворов. МГУ, М. (1980).
- [39] С.В. Терехов. Моделирование тепловых и кинетических свойств реальных систем. Вебер, Донецк (2007).
- [40] С.В. Терехов, В.Д. Запорожец. Физика и техника высоких давлений **29**, 3, 65 (2019).
- [41] А. Адамсон. Физическая химия поверхностей. Мир, М. (1979). [A.W. Adamson. Physical chemistry of surfaces. John Wiley & Sons, N.Y. (1976)].
- [42] В.Н. Захарченко. Коллоидная химия. Высш. школа, М. (1989).
- [43] М.В. Мамонова, В.В. Прудников, И.А. Прудникова. Физика поверхности. Теоретические модели и экспериментальные методы. Физмалит, М. (2011).

Редактор Т.Н. Василевская