

01,07

Динамика атомов и выделение фаз при распаде двойных сплавов

© Ю.А. Хон

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН им. В.Е. Панина,
Томск, Россия

E-mail: khon@ispms.ru

Поступила в Редакцию 28 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 14 мая 2026 г.

Принята к публикации 14 мая 2026 г.

Предложена модель распада двойных сплавов, учитывающая взаимосвязь нелинейных процессов, протекающих на различных пространственно-временных масштабах в нелинейной открытой системе ядер и электронов при всех концентрациях компонентов сплава. Характерные времена структурных изменений в сплаве определяются диффузией атомов на атомных масштабах. Кооперативные процессы изменения химического и топологического ближнего порядка на больших пространственно-временных масштабах описываются двумя параметрами порядка. Макроскопическая кинетика выделения фаз определяется двумя связанными нелинейными уравнениями параболического типа для параметров порядка, полученными в формализмах Гинзбурга–Ландау и Ландау–Халатникова. Показано, что решения уравнений в зависимости от концентрации легирующего элемента описывают пространственное распределение выделяющейся фазы, характерное как для механизма спинодального распада, так и для механизма зарождения-роста.

Ключевые слова: двойные сплавы, выделение фаз, открытая система ядер и электронов, динамика атомов, параметры порядка, механизм и кинетика выделения фаз.

DOI: 10.61011/FTT.2026.05.63434.9565

1. Введение

В двойных сплавах, находящихся при высоких температурах в однофазном состоянии, при понижении температуры наблюдаются процессы распада (расслоения). При распаде атомы смещаются на расстояния, превышающие межатомные, концентрации компонентов в выделяющихся фазах отклоняются от среднего значения, меняется химический и топологический ближний порядок, приводя к изменению свойств сплавов. Неудивительно, что изучению закономерностей распада сплавов посвящены десятки сотен (если не больше) экспериментальных и теоретических работ. Анализ полученных в этом направлении результатов, механизмов и моделей распада, проведенный в работах [1–4], показывает, что вопрос о механизме распада при различных составах сплава остается дискуссионным до сих пор. Предмет дискуссии состоит в следующем. При температуре $T > T_d$ (T_d — температура распада) сплав при всех составах находится в однофазном состоянии, $\frac{\partial^2 f(c, T)}{\partial c^2} > 0$, где $f(c, T)$ — свободная энергия сплава при концентрации c одного из компонентов (кривая 1 на рис. 1). При $T < T_d$ свободная энергия сплава (кривые 2–6) имеет два минимума в точках c_1, c_2 . Равновесному состоянию сплава соответствуют точки на общей касательной (отрезок прямой 7). В зависимости от концентрации сплава рассматриваются два механизма распада однофазного сплава: механизм спинодального распада [5–9] и механизм зарождения–роста [10,11]. Реализация того либо иного механизма определяется знаком $(\partial^2 f(c, T))/(\partial c^2)$. Первый механизм ре-

лизуется в области концентраций $c_{d1} < c < c_{d2}$, где $(\partial^2 f(c, T))/(\partial c^2) < 0$ (кривая 4 на рис. 1). В этой области однородное распределение атомов неустойчиво относительно малых возмущений концентрации $\delta c(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r}) - c$. Здесь $\mathbf{r}$ — координаты точки в декартовой системе координат. Развитие неустойчивости определяется диффузионными потоками, направленными в сторону увеличения концентрации. Инкубационный период не наблюдается. Второй механизм (зарождения–роста) реализуется в области концентраций $c_1 < c < c_{d1}$ (кривая 3 на рис. 1) и $c_{d2} < c < c_2$ (кривая 5 на рис. 1). При этих концентрациях $(\partial^2 f)/(\partial c^2) > 0$. Однофазный сплав находится в метастабильном состоянии, распределение атомов устойчиво относительно малых возмущений концентрации. Свободная энергия сплава при распаде может понижаться только при наличии зародыша с другим химическим составом, размеры которого превышают критическое значение. На кинетической кривой наблюдается инкубационный период, в течение которого, как считается, образуется критический зародыш новой фазы. Основная трудность состоит в поиске ответа на вопрос о механизме образования критического зародыша. Предполагается, что его образование определяется гетерофазными флуктуациями. Но вероятность образования критического зародыша, содержащего порядка ста атомов, при случайных смещениях атомов исчезающе мала. Поэтому при моделировании процесса распада, например, методом фазового поля зародыш новой фазы, содержащий порядка ста атомов, приходится вводить „руками“ [12,13]. Учет механизмов перехода через потенциальные барьеры промежуточных

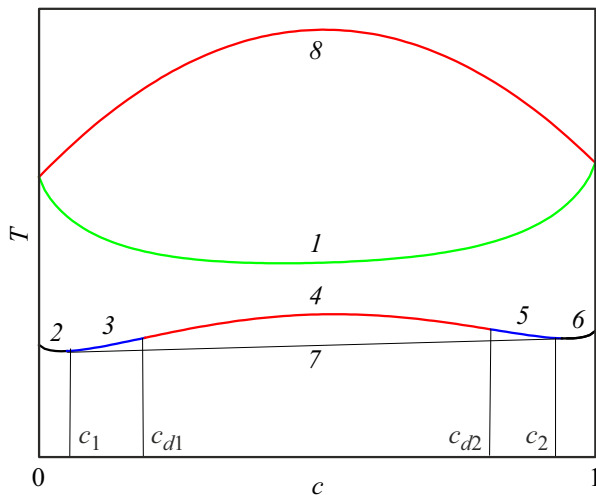


Рис. 1. Схематическое изображение фазовой диаграммы двойного распающегося сплава в координатах температура (T) — концентрация (c). Кривая 1 (зеленая кривая) — свободная энергия сплава в однофазном состоянии выше температуры распада. Кривые 2, 6 (черные кривые), 3, 5 (синие кривые), 4 (красная кривая) — свободная энергия сплава ниже температуры распада. На кривых 3, 5 вторая производная от свободной энергии по концентрации больше (меньше) нуля. Равновесному двухфазному состоянию сплава соответствуют точки на общей касательной 7. Кривой 8 (красная кривая) изображена гипотетическая зависимость свободной энергии сплава в однофазном состоянии выше температуры распада [1–4]. Концентрации c_1, c_2 — пределы растворимости, в точках c_{d1}, c_{d2} вторая производная от свободной энергии по концентрации равна нулю.

фаз повышает вероятность образования зародыша [14–18]. Присутствующие в метастабильной фазе дефекты различного типа могут понижать высоту потенциального барьера, увеличивая вероятность образования зародыша. В работе [19] классическая теория зарождения–роста обобщена на случай учета напряжений на кинетику и термодинамику выделения фаз. Рассматривается накопление напряжений, возникающее в результате образования второй фазы, в зависимости от механической нагрузки и влияние дислокаций на образование преципитатов.

Казалось бы, что наличие двух взаимно исключающих механизмов выделения фаз должно приводить к принципиальным различиям в кинетике и морфологии выделяющихся фаз при переходе через концентрации c_{d1}, c_{d2} , в которых $(\partial^2 f)/(\partial c^2) = 0$. На самом деле, таких различий не наблюдается [3–5]. Более того, выделение второй фазы наблюдается и в местах, свободных от дефектов. Причины такого противоречия существующих представлений о механизмах распада сплавов с экспериментальными фактами до сих пор не выяснены. В работах [3–5] предлагается при всех составах сплава рассматривать только механизм спинодального распада, то есть $(\partial^2 f(c, T))/(\partial c^2) < 0$ при всех концентрациях (кривая 8 на рис. 1). Но это предложение вступает

в противоречие с термодинамикой сплавов. Делаются также предположения о фазовых переходах в электронной подсистеме сплава, изменении парных межатомных взаимодействий при изменении температуры. Но эти предположения нуждаются в серьезном физическом обосновании.

Возможная причина существования двух альтернативных механизмов распада сплавов состоит в том, что в существующих подходах и моделях предполагается, что динамика атомов определяется только колебательными степенями свободы, а перераспределение атомов в сплаве — рельефом одной поверхности потенциальной энергии (ППЭ). А это, строго говоря, имеет место в стационарных состояниях изолированной системы ядер и электронов. При фазовом превращении сплав следует рассматривать как открытую квантовомеханическую систему ядер и электронов [19, 20]. В такой системе имеется не одна, а множество ППЭ. Каждому распределению атомов соответствует своя ППЭ с присущими ей распределением электронов и межатомными взаимодействиями. Изменение распределения атомов определяется переходами с одной ППЭ на другую. При этом потенциальная энергия всей системы атомов при таких переходах всегда понижается. Механизм образования зародышей новой фазы в открытой системе ядер и электронов и кинетика фазовых превращений в твердых телах при изменении топологического ближнего порядка были предложены в работах [20, 21]. Настоящая работа ставит своей целью решение задачи о распаде двойных сплавов с учетом изменения химического и топологического ближнего порядка во всем концентрационном интервале.

2. Модель сплава

Рассматривается двойной сплав AB , содержащий N_A и N_B атомов сорта A и B соответственно. Общее число атомов $N = N_A + N_B$. Величина $c = N_B/N$ — концентрация легирующего элемента. Предполагается, что свободные энергии исходных компонентов сплава и энергия смешения сплава $\Delta E(c) > 0$ известны.

При $T > T_d$ сплав с объемом $V_0(T, c)$ находится в неупорядоченном однофазном состоянии (кривая 1 на рис. 1). Свободная энергия сплава $f_0 = f_0(c, T, V_0)$, а $(\partial^2 f_0(c, T, V_0))/(\partial c^2) > 0$. Атомы легирующего элемента в объеме сплава распределены случайным образом. Все компоненты тензора деформации $\varepsilon_{ij} = 0$. Здесь $i, j = 1, 2, 3$.

При понижении температуры до $T < T_d$ объем сплава изменяется от V_0 до $V_n(c, T)$. Свободная энергия сплава $f_n = f_n(c, T, V_n)$ при распаде понижается до значения, лежащем на отрезке прямой 7 на рис. 1. Процесс выделения фаз сопровождается дальнедействующими напряжениями и неоднородной деформацией $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(c, \mathbf{r})$. Относительное изменение объема $\Delta V(c) \propto \langle \varepsilon_{ii}(c, \mathbf{r}) \rangle$. Здесь угловые скобки означают усреднение по объему сплава,

по повторяющимся индексам проводится суммирование. В общем случае недиагональные элементы $\varepsilon_{i \neq j}$ при распаде сплава могут быть не равны нулю.

3. Динамика атомов в сплаве

Решение задачи о динамике атомов в сплаве как системе ядер и электронов состоит в нахождении зависящей от времени волновой функции $\Psi(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}})$ из нестационарного уравнения Шредингера $H\Psi(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}, t) = i\hbar(\partial\Psi(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}))/(\partial t)$. Здесь $\mathbf{R}(t) = \{R_1^s(t), \dots, R_N^s(t)\}$ — координаты ядер в $3N$ -мерном пространстве, ($s = A, B$), $\tilde{\mathbf{r}}$ — совокупность координат электронов, H — гамильтониан системы. В представлении Борна–Хуана (ВН) [22]

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_j \Omega_j(\mathbf{R}, t) \Phi_j(\tilde{\mathbf{r}}; \mathbf{R}). \quad (1)$$

Здесь $\Omega_j(\mathbf{R}, t)$ — волновая функция ядер, $\Phi_j(\tilde{\mathbf{r}}; \mathbf{R})$ — волновая функция электронов в j -ом квантовом состоянии системы. Обозначение « $\tilde{\mathbf{r}}; \mathbf{R}$ » означает, что $\mathbf{R}$ входит в волновую функцию электронов как параметр. Волновые функции электронов образуют полную систему ортонормированных волновых функций ($\langle \Phi_k | \Phi_j \rangle = \delta_{kj}$). Разложение (1) выражает волновую функцию кристалла в виде суперпозиции электронных состояний, вклад каждого состояния определяется амплитудой $\Omega_j(\mathbf{R}, t)$. При этом $\Omega_j(\mathbf{R}, t) = \int \Phi_j^* \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$. После подстановки (1) в нестационарное уравнение Шредингера, умножения слева на Φ_j^* и интегрирования по координатам электронов, находятся уравнения, описывающие движение ядер

$$i\hbar \frac{\partial \Omega_j(\mathbf{R}, t)}{\partial t} = \left[- \sum_\gamma \frac{\hbar^2}{2M_\gamma} \nabla_\gamma^2 + E_j(\mathbf{R}) \right] \Omega_j(\mathbf{R}, t) + \sum_k F_{jk}(\mathbf{R}) \Omega_k(\mathbf{R}, t). \quad (2a)$$

Здесь M_γ — масса ядра с номером γ ($\gamma = 1, \dots, N$), функция $E_j(\mathbf{R})$ определяется электронной подсистемой при фиксированном распределении ядер, носит название поверхности потенциальной энергии в j -ом состоянии системы. ППЭ представляет гиперповерхность в $3N$ -мерном пространстве с характерным для нее распределением минимумов и разделяющих их потенциальных барьеров. ППЭ находится из решения стационарного уравнения Шредингера

$$H_{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \Phi_j(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = E_j(\mathbf{R}) \Phi_j(\mathbf{r}; \mathbf{R}). \quad (2b)$$

Здесь H_{el} — гамильтониан электронов. Зная распределение электронов, может быть найдена потенциальная энергия системы $E_j(\mathbf{R})$ в j -ом квантовом состоянии. Матричные элементы операторов импульса и кинетиче-

ской энергии в (2a)

$$F_{ji}(\mathbf{R}) = \int d\mathbf{r} \Phi_j^*(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \left[- \sum_\gamma \frac{\hbar^2}{2M_\gamma} \nabla_\gamma^2 \right] \Phi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}) + \sum_\gamma \frac{1}{M_\gamma} \left\{ \int d\mathbf{r} \Phi_j^*(\mathbf{r}; \mathbf{R}) - [i\hbar \nabla_\gamma] \Phi_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \right\} [i\hbar \nabla_\gamma]. \quad (3)$$

Своим происхождением они обязаны оператору кинетической энергии ядер и определяют неадиабатические связи между ядерной и электронной подсистемой.

В представлении ВН нахождение зависящей от времени волновой функции многоатомной системы состоит из двух этапов. На первом этапе из уравнений (2) находится спектр ППЭ $E_j(\mathbf{R})$, а на втором этапе из уравнений (1) — зависящая от времени волновая функция ядер $\Omega_j(\mathbf{R}, t)$. Функция распределения (ФР) атомов в j -ом квантовом состоянии $\rho_j(\mathbf{R}) = |\Omega_j(\mathbf{R})|^2$. Зная ФР $\rho_j(\mathbf{R})$, может быть найдена функция распределения атомов легирующего элемента $\rho_B(\mathbf{R})$. Этой функцией определяется химический ближний порядок в сплаве. Заметим, что концентрация атомов легирующего элемента при различных ФР автоматически сохраняется.

Обозначим через $\Psi_0(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}) = \Omega_0(\mathbf{R})\Phi_0(\tilde{\mathbf{r}}; \mathbf{R})$, $E_0(\mathbf{R})$, $\rho_{B0}(\mathbf{R})$ волновую функцию, ППЭ и ФР распределения атомов легирующего элемента в однофазном сплаве при $T < T_d$ до его распада (при $t = 0$). Динамика атомов в этом состоянии определяется рельефом ППЭ $E_0(\mathbf{R})$. Однофазное состояние сплава может быть либо неустойчивым, либо устойчивым относительно малых возмущений в распределении атомов легирующего элемента $\delta\rho_B(\mathbf{R})$. Во втором случае сплав находится в однофазном метастабильном состоянии.

После распада (при $t \rightarrow \infty$) состояние сплава описывается волновой функцией $\Psi_n(\mathbf{R}, \tilde{\mathbf{r}}) = \Omega_n(\mathbf{R})\Phi_n(\tilde{\mathbf{r}}; \mathbf{R})$, распределение атомов легирующего элемента — ФР $\rho_{Bn}(\mathbf{R})$. Динамика атомов определяется рельефом ППЭ $E_n(\mathbf{R})$. Потенциальная энергия системы $E_n[\mathbf{R}] < E_0[\mathbf{R}]$.

Изменение ФР от $\rho_0(\mathbf{R})$ до $\rho_n(\mathbf{R})$ определяется переходами с ППЭ $E_0(\mathbf{R})$ на ППЭ $E_n(\mathbf{R})$ через множество ППЭ $E_j(\mathbf{R}_j)$ с квантовыми числами $j = 1, \dots, n-1$. Два состояния j и $j+1$ различаются тем, что один из узлов кристаллической решетки, например, R_m^A , в квантовом состоянии j занят атомом A , в квантовом состоянии $j+1$ занят атомом B . Заполнение других узлов не меняется. Каждое состояние характеризуется ФР $\rho_j(\mathbf{R}) = |\Omega_j(\mathbf{R})|^2$ и ФР $\rho_{Bn}(\mathbf{R})$. Динамика атомов в j -ом состоянии определяется рельефом ППЭ $E_j(\mathbf{R}_j)$. Потенциальная энергия в этом состоянии равна $E_j[\mathbf{R}]$.

Потенциальная энергия системы при переходе из состояния с $j = 0$ в состояние с $j = n$ всегда понижается, $E_0[\mathbf{R}] > E_1[\mathbf{R}] > \dots > E_n[\rho_n(\mathbf{R})]$. Две соседние ППЭ разделены потенциальным барьером высотой E_a . В отсутствие внешних воздействий характерное время перехода между ППЭ (смещения одного атома на межатомное расстояние l_a) определяется тепловыми

флуктуациями, и

$$t_d \propto \frac{l_a^2}{D} \gg t_a, \quad (4)$$

где D — коэффициент диффузии, зависящий от температуры и высоты потенциального барьера, разделяющего два положения атома, t_a — период колебаний атомов вблизи положений равновесия. Величина D может быть определена на основе методов, изложенных, например, в работе [23].

Решение уравнений (1), (2) возможно лишь численными методами и для небольшого числа атомов. Нахождение крупномасштабных распределений атомов в сплаве при различных значениях объема сплава вряд ли возможно. И дело не только в большом числе переменных, но и в нелинейности уравнений. Небольшие отклонения в начальных данных на больших временах $t \gg t_d$ могут приводить к разным результатам. Одно и то же значение объема сплава может быть получено при различных распределениях атомов легирующего элемента. Отбор требуемых решений из множества возможных — отдельная непростая задача. В этой ситуации обратим внимание на тот факт, что в эксперименте проявляются наиболее быстрые процессы релаксации. Такие процессы в системе взаимодействующих атомов протекают при когерентных смещениях — смещениях с близкими волновыми векторами. Заметим, что когерентными (коррелированными, кооперативными) процессами описываются фазовые переходы второго рода в теории Ландау и процессы формирования паттерна в неравновесных системах [24].

4. Параметры порядка в распадающемся сплаве

Для нахождения крупномасштабных распределений, определяемых когерентными смещениями атомов, поступим следующим образом [24]. Далее рассматривается одномерный случай. Обозначим через $X = \{X_1^s, \dots, X_N^s\}$ координаты атомов в сплаве при $V = V_0$. ФР $\bar{\rho}_B(x) = \sum_i \delta(x - X_i^B)$ со стохастическим распределением атомов легирующего элемента предполагается известной, где x — координата точки, δ — дельта функция. Распределения атомов сорта A могут быть произвольными, включая распределения, характерные для дефектов различного типа. Координаты атомов и ФР могут быть найдены путем решения системы однородных стационарных уравнений (1), (2). Если сплав находится в однофазном стабильном состоянии, то решение $\bar{\rho}_B(x)$ устойчиво относительно малых возмущений $\delta \rho_B(x) = \rho_B(x + u) - \bar{\rho}_B(x) \sim \exp(ikx)$ с любым волновым вектором $k \sim 1/\lambda$. При этом $\langle \delta \rho_B(x) \rangle = 0$, то есть такие возмущения не меняют число атомов легирующего элемента, а меняют их пространственное распределение. На пороге устойчивости $V = V_{th}(T, c)$ однофазное состояние становится неустойчивым относительно малых возмущений $\delta \rho_B(x) \sim \exp(k_1 x)$ с волновым

вектором k_1 и характерным временем t_1 . Вблизи безразмерного порога устойчивости $a_1 = (V_{th} - V)/V_{th} \ll 1$ изменение ФР ищется в виде суперпозиции плоских волн с волновыми векторами $k = k_1 \pm \Delta k$ ($\Delta k/k_1 \ll 1$). Среднее значение такой суперпозиции по-прежнему равно нулю, и число атомов разного сорта автоматически сохраняется. Близость волновых векторов означает, что рассматриваются когерентные смещения атомов легирующего элемента, при которых происходят переходы на ППЭ с меньшими значениями потенциальной энергии сплава. Суперпозиция плоских волн с близкими волновыми векторами, как известно, описывает биения с амплитудой $\varphi(x, t)$ на пространственных масштабах $l_1 \propto 1/k_1$ и временах $t_1 \propto t_d$. Вблизи безразмерного порога устойчивости функция распределения $\rho_B(x, t)$ записывается в виде [24]

$$\rho_B(x, t) - \bar{\rho}_B(x) = \tilde{\rho}[\varphi(x, t) \exp(ik_1 x) + cc], \quad (5)$$

где $\tilde{\rho}$ — параметр, определяемый свойствами среды, cc означает комплексное сопряжение. В физике амплитуду неустойчивой моды φ , следуя теории Ландау, принято называть параметром порядка (ПП). В однофазном устойчивом состоянии сплава $\varphi = 0$. Отметим, что кроме распределения (5) возможны и другие распределения. Но характерное время образования распределения (5) является наименьшим. По этой причине оно и проявляется в эксперименте. Все другие распределения либо не проявляются, либо их вклад мал.

При нахождении компонент тензора деформации $\varepsilon_{ij}(x, \varphi)$ рассматриваются когерентные смещения атомов, определяемые колебательными степенями свободы. При $\varphi = 0$ деформация среды $\bar{\varepsilon}_{ij}(V)$ однородна, малые смещения атомов $\propto \exp(ikx)$ с любым волновым вектором k приводят к увеличению свободной энергии системы, а потому затухают. При увеличении ПП φ $\Delta \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(x, \varphi) - \bar{\varepsilon}_{ij}(V) = 0$ при всех значениях i, j вплоть до некоторого порогового значения $\varepsilon_{ij}^{tr}(V, \varphi)$. На пороге устойчивости $\varepsilon_{ij}^{tr}(V, \varphi)$ имеется неустойчивая мода смещений атомов $\propto \exp(ik_2 x)$ с волновым вектором $k_2 < k_1$ и частотой $\omega_2 \propto 1/t_2$. Выше порога устойчивости малые возмущения нарастают и одно либо несколько значений $\Delta \varepsilon_{ij} \neq 0$. То есть выделение фаз при распаде сплава может сопровождаться и объемной и сдвиговой деформаций. Вблизи безразмерного порога устойчивости

$$a = \frac{\varepsilon_{ij}(V, \varphi) - \varepsilon_{ij}^{tr}(V)}{\varepsilon_{ij}^{tr}(V)} \ll 1$$

деформация определяется суперпозицией плоских волн с волновыми векторами $k = k_2 \pm \Delta k$ ($\Delta k/k_2 \ll 1$). Пространственно-временное распределение компонент тензора деформации при фазовом превращении записывается в виде

$$\varepsilon_{ij}(x, t) - \bar{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{ij}^0[\eta(x, t) \exp(ik_2 x) + cc]. \quad (6)$$

Здесь коэффициент ε_{ij}^0 определяет величину деформации, $\eta(x, t)$ — амплитуда неустойчивой моды (ПП), характеризующая неоднородную деформацию среды на пространственных масштабах $l_2 \propto 1/k_2 > l_1$. В линейном приближении

$$a = -1 + \frac{\varepsilon_{ij}(\varphi)}{\varepsilon_{ij}^{tr}} = -1 + p(V)\varphi,$$

$$p(V) = \frac{1}{\varepsilon_{ij}^{tr}} \frac{d\varepsilon_{ij}(\varphi)}{d\varphi} > 0. \quad (7)$$

Динамика выделения фаз в сплаве определяется параметрами порядка ϕ, η .

5. Уравнения для параметров порядка

При распаде сплава протекают те процессы, при которых свободная энергия системы атомов понижается. Относительное изменение объема и величина сдвиговой деформации при ФП, как правило, не превышают десяти процентов. Это позволяет считать ПП φ, η малыми параметрами. Поэтому для нахождения уравнений для ПП можно воспользоваться подходами Гинзбурга—Ландау разложения плотностей свободной энергии $f_\varphi(\varphi, \eta)$, $f_\eta(\varphi, \eta)$ в ряд по ПП φ, η и их градиентам соответственно, а затем из уравнения Ландау—Халатникова можно получить уравнения для ПП. Полученные таким образом уравнения (см. Приложение) в безразмерных переменных имеют вид (знак „ $\sim$ “ опущен)

$$\tau \partial_t \varphi = (\alpha - \gamma \eta) \varphi + \beta \varphi^2 - \varphi^3 + l^2 \partial_{x_2}^2 \varphi. \quad (8)$$

$$\partial_t \eta = (-1 + d\varphi)\eta - \eta^3 + \partial_{x_2}^2 \eta, \quad (9)$$

где

$$\tau = \frac{t_1}{t_2}, \quad l = \frac{l_1}{l_2}. \quad (10)$$

Коэффициенты в уравнениях (8), (9) являются параметрами, определяемыми свойствами сплава. В (8) параметр γ характеризует увеличение упругой энергии системы при зарождении новой фазы. Знак „–“ перед коэффициентом γ в правой части уравнения (8) показывает, что упругая деформация среды увеличивает свободную энергию системы, препятствуя тем самым дальнейшему увеличению химического ближнего порядка. Уравнение (8) описывает динамику бистабильной среды. Бистабильность определяется тем, что при фазовом превращении сплав может быть стабильным, метастабильным и неустойчивым. Уравнение (9) представляет вещественное уравнение Гинзбурга–Ландау.

6. Однородные стационарные решения и их устойчивость

Уравнения (8), (9) всегда имеют однородное стационарное решение (ОСР) $\eta_0 = 0$, $\varphi_0 = 0$, описывающее

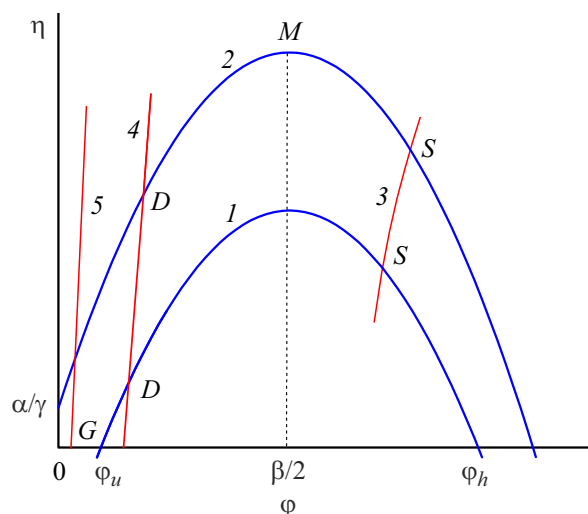


Рис. 2. Нуль-изоклины уравнений (13) (кривые 1, 2) при $\alpha < 0$ (кривая 1), $\alpha > 0$ (кривая 2) и (14) (кривые 3–5).

однофазное состояние сплава со стохастическим распределением атомов легирующего элемента. Стандартный анализ устойчивости показывает, что это решение устойчиво относительно малых однородных и неоднородных возмущений $\delta\varphi$, $\delta\eta$ при

$$-\tau + \alpha < 0, \quad (11)$$

$$-\alpha > 0. \quad (12)$$

При $\alpha < 0$ эти неравенства всегда выполняются, что имеет место для однофазного сплава, находящегося в стабильном состоянии при $T > T_d$. ОСР, соответствующие другим состояниям сплава, находятся из уравнений

$$(\alpha - \gamma\eta) + \beta\varphi - \varphi^2 = 0, \quad (13)$$

$$(-1 + d\varphi) - \eta^2 = 0. \quad (14)$$

ОСР определяются точками пересечения кривых (13), (14), приведенными на рис. 2 при $\alpha < 0$ и $\alpha > 0$ (кривые 1 и 2 соответственно).

Парабола (13) пересекает ось φ в точках

$$\varphi = \varphi_u = \frac{\beta}{2} - \left(\frac{\beta^2}{4} + \alpha \right)^{1/2}$$

И

$$\varphi = \varphi_h = \frac{\beta}{2} + \left(\frac{\beta^2}{4} + \alpha \right)^{1/2}.$$

При $\alpha > \alpha_m = -2\beta^2/9$, фиксированных значениях остальных параметров кривая (14) может пересекать параболу (13) в двух характерных точках S, D . ОСР $\eta_S > 0$, $\varphi_S > 0$, $\eta_D > 0$, $\varepsilon_D > 0$ в этих точках существуют при

$$d_D > d_M > d_S > d_0. \quad (15)$$

Однородные стационарные решения уравнений (13), (14) и их устойчивость

N	Решение	Соотношения между параметрами уравнений	Характеристика решения
1	$\eta_0 = 0, \varphi_0 = 0$	$\alpha < \alpha_{el} = -\beta^2/4$	Единственно и устойчиво
		$\alpha_{el} < \alpha < \alpha_m$	Стабильно
		$\alpha_m < \alpha < 0$	Метастабильно
		$\alpha > 0$	Неустойчиво
2	η_0, φ_u	$\alpha > \alpha_{el}$	Неустойчиво
3	η_0, φ_h	$\alpha_{el} < \alpha < \alpha_m$	Метастабильно
		$\alpha_m < \alpha < 0$	Стабильно
		$\alpha > \alpha_m$	Неустойчиво при $d_i > d_0$
4	$\eta_s > 0, \varphi_s > 0$	$d_M > d_s > d_0$	Устойчиво относительно однородных и неоднородных возмущений
5	$\eta_D > 0, \varphi_D > 0$	$d_G > d_D > d_M$	Неустойчиво относительно неоднородных возмущений

В (15) $d_0 = 1/\varphi_h$ — значение d , меньше которого кривые (13), (14) не пересекаются. При

$$d = d_M = \frac{2}{\beta} \left[1 + \left(\frac{\beta^2 + 4\alpha}{4\gamma} \right)^2 \right]$$

пересечение кривых происходит в вершине параболы (13) (точка М на рис. 2) при $\varphi = \beta/2$. ОСР уравнений (13), (14) и устойчивость решений $\eta_s, \varphi_s, \eta_D, \varphi_D$ относительно малых однородных, неоднородных возмущений и возмущений конечной амплитуды $\Delta\varphi > \varphi_{in}$ приведены в таблице. Параметром β определяются границы устойчивости однофазного состояния и величины ПП φ_u (решение № 2) и φ_h (решение №3).

При $T > T_d$ однофазное состояние сплава стабильно во всем концентрационном интервале. Соответствующее этому состоянию сплава решение η_0, φ_0 стабильно при $\alpha(c, T) < \alpha_m < 0$. При $T < T_d$ сплав распадается. Однофазное состояние сплава неустойчиво в интервале концентраций $c_{d1} < c < c_{d2}$ (см. рис. 1). Решение η_0, φ_0 неустойчиво при $\alpha > 0$. Отсюда следует, что $\alpha(c) > 0$ при $c_{d1} < c < c_{d2}$. Однофазное состояние сплава метастабильно при концентрациях $c_1 < c < c_{d1}, c_{d2} < c < c_2$. Решение η_0, φ_0 метастабильно при $\alpha_m < \alpha < 0$. Параметр $\alpha(c, T) = 0$ в точках $c = c_{d1}, c = c_{d2}$. Заметим, что при $T = T_d$ в точке

$$c = c_{d1} = c_{d2} \frac{\partial^2 f(c, T)}{\partial c^2} = 0.$$

При этой температуре и концентрации $\alpha(c, T_d) = 0$. Поэтому при $T \gtrsim T_d(c)$ $\alpha(c) < 0$. То есть в однофазном состоянии в сплаве перед его распадом могут образовываться метастабильные структуры, которые выступают в качестве зародышей новой фазы.

7. Кинетика выделения фаз в сплавах

Кинетика выделения фаз в сплавах описывается решениями $\varphi(x, t), \eta(x, t)$ системы уравнений (13), (14) при переходе из состояния η_0, φ_0 в одно из состояний $\eta_s, \varphi_s, \eta_D, \varphi_D$ (решения № 4, № 5 соответственно в таблице). При $t > 0, \eta = 0$ линеаризованное уравнение (13) имеет решение $\varphi \propto \exp(\alpha t/\tau)$. При $\alpha > 0$ величина ПП φ возрастает при сколь угодно малом начальном возмущении. Развитие неустойчивости с самого начала может происходить при наличии малых возмущений, образованных смещениями атомов легирующего элемента в состояния с меньшей потенциальной энергией. В интервале концентраций $c_{d1} < c < c_{d2}$ расстояния между атомами легирующего элемента сравнимы с межатомными. Поэтому время образования малых возмущений сравнимо со временем перехода атомов сорта В из одного узла кристаллической решетки в соседний. При $\alpha < 0$ уравнение (13) при $\Delta\varphi < \varphi_u$ имеет единственное решение $\varphi = 0$, а возрастающее со временем решение $\varphi(t) > 0$ существует при наличии начального возмущения с амплитудой $\Delta\varphi > \varphi_u$. Величина φ_u определяет пороговое значение амплитуды. В метастабильном состоянии начальное возмущение $\Delta\varphi$ по-прежнему определяется смещениями атомов в положения с меньшим значением потенциальной энергии. Однофазное состояние сплава метастабильно при концентрациях $c < c_{d1}, c_{d2} < c$. Расстояние между атомами легирующего элемента превышает межатомные. Поэтому время, в течение которого амплитуда начального возмущения достигнет пороговое значение, будет превышать время перехода атомов из одного узла кристаллической решетки в соседний. Этим и объясняется наличие инкубационного периода на первой стадии выделения фазы.

Неустойчивым относительно неоднородных возмущений ПП является ОСР $\eta_D > 0, \varphi_D > 0$. Развитие

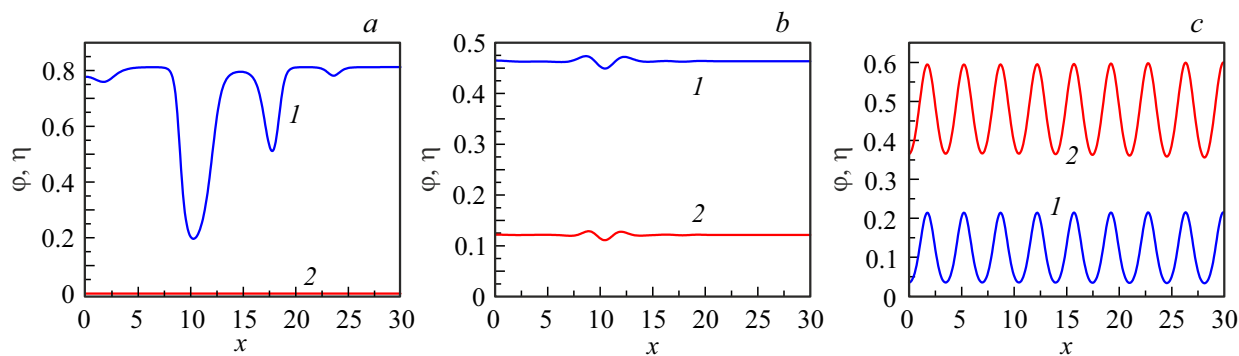


Рис. 3. Пространственное распределение параметров порядка ϕ (кривые 1), η (кривые 2) в моменты времени $t = 100$ (a), $t = 150$ (b), $t = 1000$ (c).

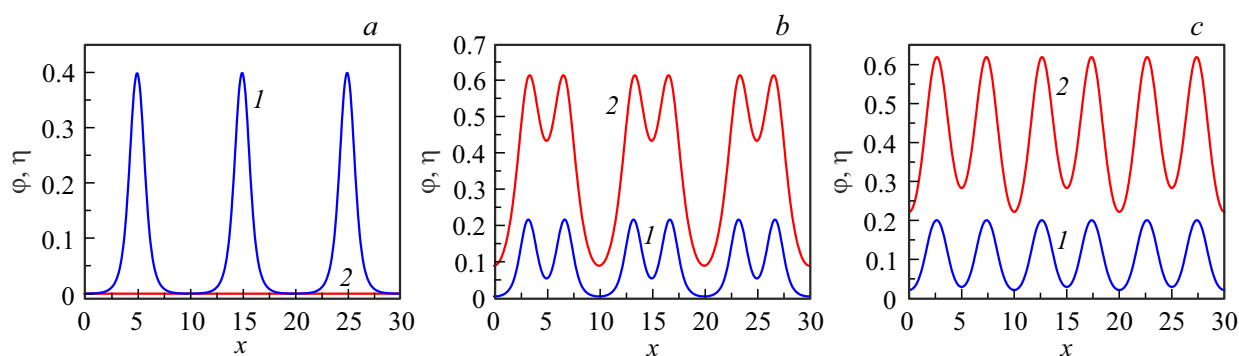


Рис. 4. Пространственное распределение параметров порядка ϕ (кривые 1), η (кривые 2) в моменты времени $t = 50$ (a), $t = 150$ (b), $t = 300$ (c) в неустойчивом однофазном состоянии.

неустойчивости приводит к формированию пространственно-неоднородного распределения ПП. Стационарное пространственно-неоднородное распределение ПП существует при выполнении неравенств [25]

$$\tau < 1, \quad l \ll 1, \quad \tau > l. \quad (16)$$

Третье неравенство в (16) с учетом (10) можно переписать в виде $v_2 = l_2/t_2 > v_1 = l_1/t_1$. Вместе с первыми двумя неравенствами в (16) это означает, что процессы изменения химического ближнего порядка являются короткодействующими и более инерционными по сравнению со смещениями атомов при упругой деформации.

Система уравнений (8), (9) решалась численными методами в интервале $0 \leq x \leq X$ при периодических граничных условиях. Начальное возмущение для переменной η при всех значениях α взято стохастическим с амплитудой $0 \leq \Delta\phi(x) \leq 10^{-2}$. Начальное возмущение для ПП ϕ взято двух типов. Первый тип — это стохастическое возмущение с амплитудой $0 \leq \Delta\phi(x) \leq \phi_a$. Второй тип — локализованное возмущение вида $\Delta\phi(x) = \Delta\phi_0 \exp[-\sigma_\phi(x-x_0)^2]$. Здесь $\Delta\phi_0$, σ_ϕ , x_0 — амплитуда, дисперсия и координата начального возмущения соответственно. Возмущения данного типа могут создаваться присутствующими в сплаве дефектами кристаллического строения. Средние значения $\langle \Delta\phi(x) \rangle$ при разных видах начального возмущения

и любых значениях α выбирались равными. Это условие учитывает сохранение среднего значения концентрации атомов легирующего элемента в сплаве данного состава.

7.1. Выделение фаз в неустойчивом однофазном состоянии

Однофазное состояние неустойчиво относительно малых возмущений ПП при $\alpha > 0$. Как видно из рис. 2, ОСР $\eta_D > 0$, $\phi_D > 0$ существует при всех значениях параметра d . На рис. 3 приведено распределение ПП в различные моменты времени при возмущениях первого типа для

$$\alpha = 0.01, \quad \beta = 0.8, \quad \gamma = 0.2, \quad d = 10, \quad l = 0.09, \quad \tau = 0.8. \quad (17)$$

Для выбранных значений параметров $\eta_D \approx 0.46$, $\phi_D \approx 0.12$, $\phi_h \approx 0.81$, $d_M \approx 4.31$, $\langle \Delta\phi(x) \rangle = 0.005$, $\langle \eta(x) \rangle = 0.005$. Из рис. 3 видно, что в стационарном состоянии формируется пространственно-периодическое распределение ПП, характерное для сплава, распад которого идет по спиновальному механизму.

Распад сплава протекает в два этапа. На первом этапе вначале происходит увеличение ПП ϕ (меняется распределение атомов легирующего элемента), ПП $\eta \approx 0$ (рис. 3, a). При выполнении неравенства

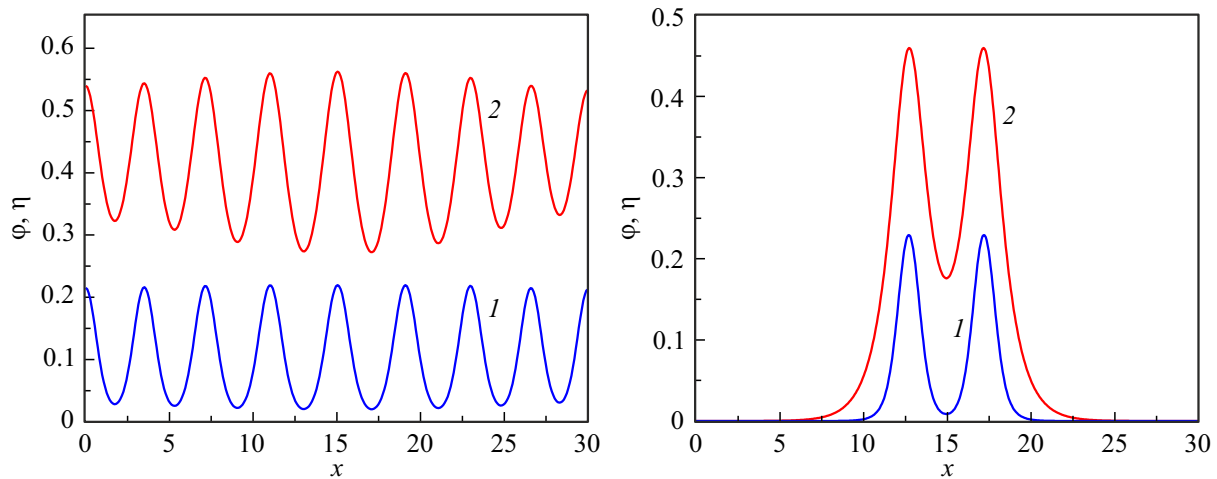


Рис. 5. Пространственное распределение параметров порядка φ (кривые 1), η (кривые 2) при $\alpha = -0.001$ (левая панель), $\alpha = -0.02$ (правая панель).

$d\varphi > 1$ ПП η начинает расти (рис. 3, b). Скорость его роста определяется величиной $(-1 + d\varphi)$. Это видно из уравнения (9), в котором $\dot{\eta} \sim (-1 + d\varphi)\eta$. При этом ПП φ меняется незначительно. К моменту времени $t \approx 1000$ оба ПП принимают значения $\langle \eta \rangle \approx 0.47$, $\langle \varphi \rangle \approx 0.11$, близкие к стационарным (рис. 3, c). В общем случае распад сплава сопровождается объемной и сдвиговой деформацией. Для возмущений второго типа условие $\langle \Delta\varphi(x) \rangle = 0.005$ выполняется, например, при $\Delta\varphi_0 = 0.02$, $\sigma_\varphi = 1$, $x_0 = 5, 15, 25$. Хотя динамика формирования пространственного распределения ПП (рис. 4) отличается от динамики, приведенной на рис. 3, но при больших временах качественных различий не возникает. То есть пространственно-периодическое распределение ПП слабо зависит от начальных условий. Причина такого поведения состоит в следующем. На периферии локализованного возмущения в уравнении (13) $\partial_{x^2}^2 \varphi > 0$, что дает положительный вклад в увеличение ПП φ . В окрестности максимума возмущения $\partial_{x^2}^2 \varphi < 0$, и максимум φ расщепляется.

7.2. Выделение фаз в метастабильном состоянии

При $\alpha < 0$ однофазное состояние метастабильно, $\varphi_u(\alpha) > 0$. И здесь в зависимости от величины α возможны два случая. При $d < 1/\varphi_u$ кривые 1, 4 на рис. 2 пересекаются в точке D. В этом случае для перехода из стационарного состояния $\eta_D > 0$, $\varphi_D > 0$ в стационарное состояние $\Delta\varphi_D > 0$, $\varphi_D > 0$ начальное возмущений с амплитудой $\Delta\varphi_0 > \varphi_u$ не требуется. Реализуется механизм гомогенного распада. Формируется такое же пространственно периодическое распределение ПП, как и при $\alpha > 0$. В качестве примера на рис. 5 приведены стационарные распределения ПП для $\alpha = -0.001$ и возмущениях первого типа. Остальные параметры взяты теми же, как и в (17). При $\alpha = -0.001$ $\varphi_u \approx 0.001$.

Видно, что принципиальных различий в картине распределения ПП по сравнению с приведенным на рис. 3, c нет. Как указывалось выше, смена знака α происходит в точках $c = c_{d1}$ или $c = c_{d2}$. Поэтому сами точки $c = c_{d1}$ или $c = c_{d2}$ по картине распада не могут быть экспериментально зафиксированы. Этот вывод имеет экспериментальное подтверждение [1–3].

При уменьшении (увеличении) концентрации, например, от $c = c_{d1}$ ($c = c_{d2}$) в сторону $c = c_1$ ($c = c_2$) параметр α уменьшается, величина φ_u возрастает, выполняется неравенство $d > 1/\varphi_u$. Кривая 5 пересекается с кривой 1 на рис. 2 не в точке D, а в точке G, где $\eta_G = 0$, $\varphi_G < \varphi_u$. Возрастающее со временем решение $\varphi(t) > 0$ существует при наличии начального возмущения (зародыша) с амплитудой $\Delta\varphi > \varphi_u$. В данной работе образование такого зародыша не рассматривается. Но вполне возможно, что предложенный в работе [26] метод, основанный на теории возмущений, может быть использован для описания образования зародышей с амплитудой, превышающей критическое значение. Анализ расчетов показывает, что результат зависит от типа начального возмущения. Например, при $\alpha = -0.02$ и значениях остальных параметров, приведенных в (23), $\varphi_u = 0.026$. Для возмущений первого типа с амплитудой $\Delta\varphi = 0.01$ $\langle \Delta\varphi(x) \rangle = 0.005$, и $\langle \Delta\varphi(x) \rangle < \varphi_u$. При таких возмущениях вторая фаза не выделяется. Механизм гомогенного распада не реализуется. Но для возмущений второго типа выполнение условия $\langle \Delta\varphi(x) \rangle > \varphi_u$ не требуется, и реализуется механизм зарождения–роста. Например, при локализованном возмущении с амплитудой $\Delta\varphi_0 = 0.04$, $\sigma_\varphi = 1$ в расчетном интервале $0 \leq x \leq 30$ $\langle \Delta\varphi(x) \rangle = 0.004$. Тем не менее, такое возмущение нарастает и при $t \approx 400$ образуется стационарное распределение ПП с двумя максимумами (рис. 5), внешне похожее на два сросшихся зародыша. При этом $\langle \varphi(x) \rangle = 0.03$, $\langle \eta(x) \rangle = 0.09$.

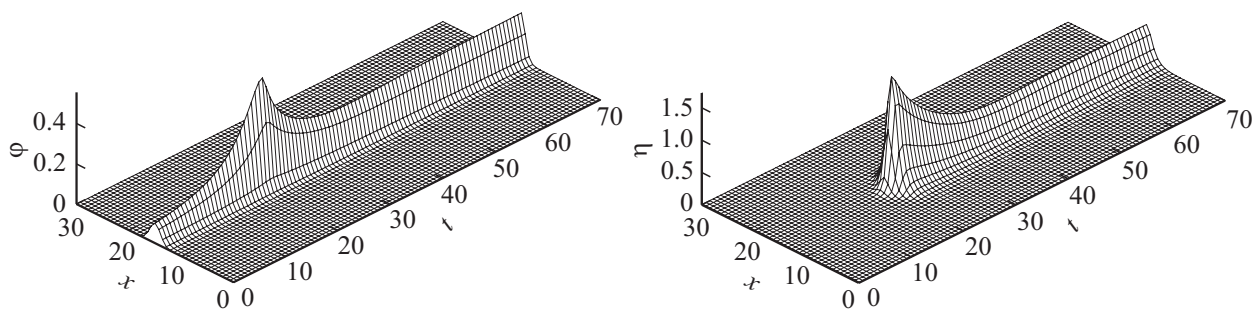


Рис. 6. Пространственно-временное распределение параметров порядка φ (левая панель) и η (правая панель) в статическом автосолидоне.

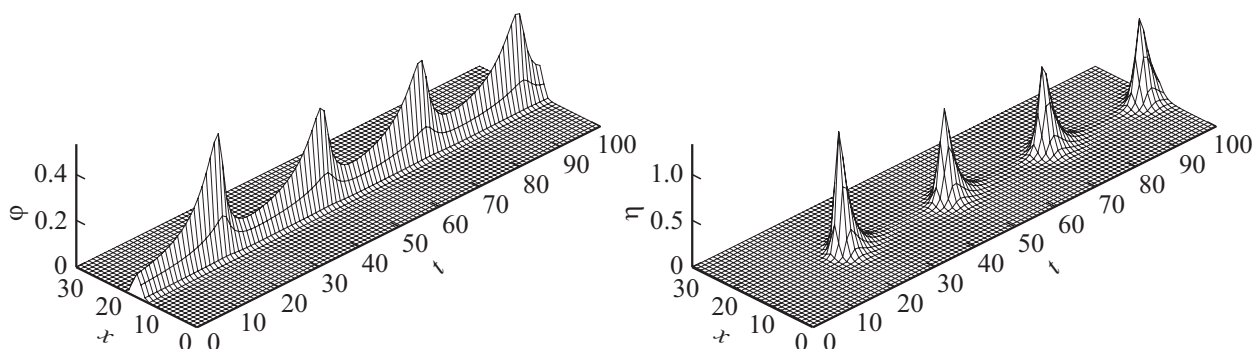


Рис. 7. Пространственно-временное распределение параметров порядка φ (левая панель) и η (правая панель) в осциллирующем автосолидоне.

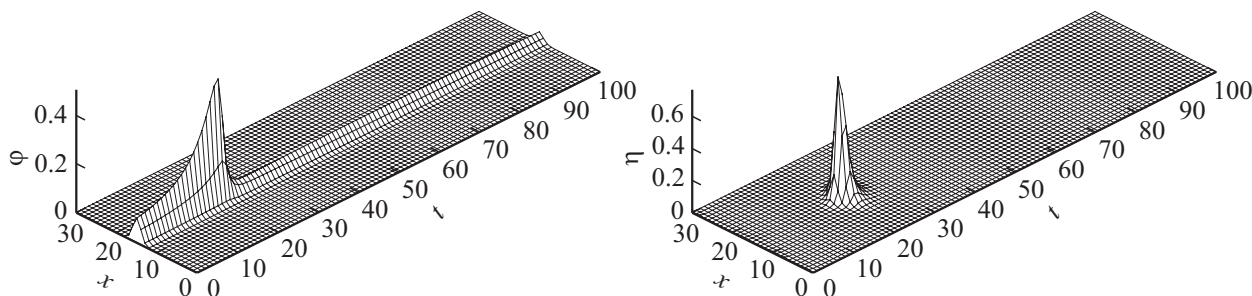


Рис. 8. Пространственно-временное распределение параметров порядка φ (левая панель) и η (правая панель) в затухающем автосолидоне.

При дальнейшем уменьшении α при наличии начального возмущения конечной амплитуды устойчивыми оказываются локализованные распределения ПП с одним максимумом. В работе [25] такие локализованные метастабильные распределения переменных названы автосолидонами (АС). Различают три типа АС: статические, осциллирующие и затухающие. Например, при $\alpha = -0.03$ $\varphi_u = 0.04$, $\varphi_h \approx 0.76$. При $\Delta\varphi_0 = 0.1$ ($\langle\Delta\varphi(x)\rangle = 0.008$) $\gamma = 0.1$ формируется статический АС, распределение ПП в котором приведено на рис. 6. Величина $\langle\varphi(x)\rangle = 0.04$, $\langle\eta(x)\rangle = 0.01$.

Осциллирующий АС возбуждается при большем значении γ . На рис. 7 приведены распределения ПП в осциллирующем АС при $\gamma = 0.4$. При увеличении γ частота осцилляций и их амплитуда уменьшаются.

При $\gamma = 1$ на рис. 8 приведено распределение ПП в затухающем АС, $\langle\varphi(x)\rangle = 0.02$, $\langle\eta(x)\rangle = 0.06$. Видно, что с течением времени амплитуда ПП уменьшается. При этом амплитуда ПП φ убывает медленнее, чем амплитуда ПП η . То есть устойчивый зародыш не образуется. Но кластеры атомов с другим химическим ближним порядком могут присутствовать длительное время и выступать в качестве начального возмущения.

8. Заключение

В двойных сплавах, имеющих тенденцию к распаду, ключевая роль в процессах перераспределения атомов отведена динамике ядер и электронов. Изменения распределения атомов при всех концентрациях компонен-

тов определяются переходами в состояния с меньшими значениями потенциальной энергии. При отсутствии внешних воздействий характерное время перехода определяется механизмом диффузии.

Протекающие на атомных масштабах диффузионные процессы приводят к неустойчивости однородного распределения атомов легирующего элемента. Развитие неустойчивости на масштабах, превышающие атомные, определяется коррелированными процессами в нелинейной системе ядер и электронов и описывается двумя амплитудами неустойчивых мод — параметрами порядка. Первая мода характеризует коллективные смещения атомов, приводящие к изменению химического ближнего порядка, а вторая — к упругой деформации при изменении топологического ближнего порядка.

Динамика двух коллективных мод на масштабах, превышающих атомные, описывается системой двух связанных нелинейных уравнений параболического типа для параметров порядка. Решения уравнений для сплава, не содержащего дефекты кристаллического строения, получены следующие результаты.

Однофазное состояние сплава при температуре ниже температуры распада может быть либо неустойчивым, либо метастабильным. Найдены соотношения между параметрами уравнений, определяющими границу раздела указанных состояний.

В неустойчивом однофазном состоянии сплава малые, в том числе случайные возмущения в распределении атомов легирующего элемента нарастают, и развитие неустойчивости приводит к формированию пространственно-периодического распределения выделяющейся фазы, характерного для механизма спинодального распада. Инкубационный период отсутствует. Вид начального возмущения слабо влияет на пространственное распределение выделившейся фазы.

В метастабильном однофазном состоянии сплава в зависимости от концентрации легирующего элемента возможны два случая. Вблизи границы, разделяющей неустойчивое и метастабильное однофазное состояние, малые случайные возмущения могут нарастать, и формируются пространственно-периодические распределения зародышей выделяющихся фаз, характерные для неустойчивого однофазного состояния. При удалении от указанной границы потеря устойчивости метастабильной фазы вызывается локализованными распределениями атомов с амплитудой, превышающей пороговое значение, и с ближним порядком, характерным для выделяющейся фазы. Эти распределения выступают в качестве зародышей, и их возникновение связано с переходами атомов в состояния с меньшим значением потенциальной энергии. Время образования зародышей определяет инкубационный период зарождения фазы. Присутствующие в сплаве дефекты кристаллического строения способствуют образованию начального локализованного возмущения.

Полученные результаты показывают, что выделение фаз при всех концентрациях компонентов определяются

динамикой атомов в открытой системе ядер и электронов на атомных масштабах и коллективными процессами на больших пространственно-временных масштабах. Прежние представления о двух механизмах распада в двойных сплавах, сформулированные несколько десятилетий назад, не учитывают этот факт.

Благодарности

Автор благодарит Л.Б. Зуева за интерес к работе, полезные советы и замечания.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2026-006.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Приложение

Функционалом Гинзбурга—Ландау является свободная энергия системы, плотность которой

$$f(\rho, \varepsilon_{ij}, T) = f(\varphi, \eta, T) \\ = f_1(\varphi, \eta, T) + f_2(\varphi, \eta, T), \quad (\text{П.1})$$

где f_1, f_2 — вклады, определяемые химическим и топологическим ближним порядком. Разложение Гинзбурга—Ландау функции $f_1(\varphi, \eta, T)$ по степеням и градиентам φ при постоянном значении η представлено в виде

$$f_1(\varphi, \eta, T) - f_{10}(T) = \left[-\frac{\alpha\varphi^2}{2} - \frac{q_2\varphi^3}{3} + \frac{q_3\varphi^4}{4} + \frac{g\eta\varphi^2}{2} + \frac{l_1^2(\nabla\varphi)^2}{2} + \dots \right]. \quad (\text{П.2})$$

Здесь f_{10} — постоянное слагаемое, коэффициенты разложения $g(T) > 0, q_2(T) > 0, q_3(T) > 0$, коэффициент α может иметь разный знак. Коэффициенты разложения являются параметрами, определяющими число минимумов функции f_1 и значения ДПП φ в точках минимума. Минимумам свободной энергии соответствуют стационарные состояния системы. Нетрудно видеть, что функция f_1 может иметь как один, так и два минимума (бистабильная среда). При $\alpha < 0$ функция f_1 имеет минимум в точке $\varphi = 0$, а при $\alpha > 0$ — минимум в точке $\varphi > 0$. Знак „+“ перед коэффициентом g в правой части уравнения (П.2) означает, что возбуждение ДПП η повышает потенциальную энергию.

Уравнение Ландау–Халатникова ($\partial_t \varphi \sim -\partial f_1 / \partial \varphi$) с функцией (П.2) имеет вид

$$t_1 \partial_t \varphi = [\alpha - g\eta] \varphi + q_2 \varphi^2 - q_3 \varphi^3 + l_\varphi^2 \partial_x^2 \varphi. \quad (\text{П.3})$$

Здесь и далее использованы обозначения производных $\partial_t \equiv \partial / \partial t$, $\partial_x^2 \equiv \partial^2 / \partial x^2$. Уравнение (П.3) представляет уравнение эволюции бистабильной среды.

Разложение плотности потенциальной энергии $f_2(\varphi, \eta, T)$ по степеням η и $\nabla \eta$ записывается в виде

$$U_2(\varphi, \eta, T) - U_{20}(T) \sim \left[-a(\varphi) \frac{\eta^2}{2} + \frac{b\eta^4}{4} + \frac{l_\eta^2 (\nabla \eta)^2}{2} + \dots \right]. \quad (\text{П.4})$$

Здесь коэффициент разложения $b > 0$. Знак „–“ перед a_2 в правой части уравнения (П.4) означает, что потенциальная энергия понижается при $a_2 > 0$. Уравнение Ландау–Халатникова с функцией (П.4) с учетом (7) принимает вид

$$t_2 \partial_t \eta = (1 - p\varphi)\eta - b\eta^3 + l_\eta^2 \partial_x^2 \eta \quad (\text{П.5})$$

и носит название вещественного уравнения Гинзбурга–Ландау. В безразмерных переменных

$$\tilde{t} = \frac{t}{t_2}, \quad \tilde{x} = \frac{x}{l_2}, \quad \tilde{\eta} = \eta b^{1/2}, \quad \tilde{\varphi} = \varphi q_3^{1/2}, \quad \beta = q_2 q_3^{-1/2},$$

$$d = p q_3^{-1/2}, \quad \gamma = g b^{-1/2}. \quad (\text{П.6})$$

уравнения (П.3) и (П.5) переписываются в виде (13), (14).

Список литературы

- [1] Ю.И. Устиновщиков. Выделение второй фазы в твердых растворах. Наука, М. (1988). 172 с.
- [2] Ю.И. Устиновщиков, Б.Е. Пушкарев. УФН **176**, 611 (2006).
- [3] Ю.И. Устиновщиков. УФН **184**, 723 (2014).
- [4] Ю.И. Устиновщиков. УФН **190**, 715 (2020).
- [5] J.W. Cahn. Acta Met. **9**, 9, 795 (1961).
- [6] J.W. Cahn. Acta Met. **10**, 3, 907 (1962).
- [7] J.W. Cahn. Acta Met. **14**, 12, 1685 (1966).
- [8] M.A. Hillert. Acta Met. **9**, 6, 525 (1961).
- [9] J.E. Hilliard. The mechanism of phase transformation in crystalline solids // Phase transformation. ASM, Metals Park, Ohio (1970). 497 p.
- [10] M. Volmer, A. Weber. Ztsch. Phys. Chem. **119**, 277 (1926)
- [11] Nucleation theory and application // Ed. by J.W.P. Schmelzer. Wiley-VCH (2006).
- [12] Y.M. Jin, A.G. Khachatryan. J. Appl. Phys. **100**, 013519-1 (2006).
- [13] J. Boisse, H. Zapolsky, A.G. Khachatryan. Acta Mater. **59**, 7, 2656 (2011).
- [14] S.A. Kukushkin and A.V. Osipov. Prog. Surf. Sci. **151**, 1, 1 (1996). DOI: 10.1016/0079-6816(96)82931-5
- [15] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Химическая физика **15**, 9, 5 (1996).
- [16] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. УФН **168**, 1083 (1998).

- [17] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ФТТ **56**, 4, 761 (2014).
- [18] С.А. Кукушкин. В сб. Физико-химические аспекты предельных состояний и структурных превращений в сплошных средах, материалах и технических системах. Санкт-Петербург (2024). С. 7–37.
- [19] Kh. Dang, L. Capolungo. J. Mech. Phys. Solids Part A **206**, 106374 (2026). DOI: 10.1016/j.jmps.2025.106374
- [20] Ю.А. Хон. ФТТ **65**, 8, 1263 (2023). DOI: 10.21883/FTT.2023.08.56142.100. [Yu.A. Khon. Phys. Solid State **65**, 8, 1211 (2023). DOI: 10.21883/PSS.2023.08.56564.100]
- [21] Ю.А. Хон. ФТТ **66**, 3, 342 (2024). DOI: 10.61011/FTT.2024.03.57473.7 [Yu.A. Khon. Phys. Solid State **66**, 3, 328 (2024). DOI: 10.61011/PSS.2024.03.57933.7]
- [22] М. Борн, Х. Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. ИЛ, М. (1958). 488 с. [M. Born, K. Huang. Dynamical theory of crystal lattices. Oxford University Press, Oxford (1954).]
- [23] A.V. Bakulin, L.S. Chumakova, S.E. Kulkova. Phys. Meso-mech. **28**, 1, 55 (2025). DOI: 10.1134/S1029959924600836.
- [24] P.C. Hohenberg, A.P. Krekhov. Phys. Rep. **572**, 1 (2015).
- [25] Б.С. Кернер, В.В. Осипов. УФН **157**, 201 (1989).
- [26] П.В. Гордон, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ФТТ, **44**, 11, 2079 (2002).

Редактор А.Н. Смирнов