

ХИМИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И ТЕРМОХИМИЯ

УДК 669.112:544.015.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА КОЛОНИЙ ПРИ СПИНОДАЛЬНОМ РАСПАДЕ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ ФАЗ

© 2009 г. И. К. Разумов

E-mail: iraz@k66.ru

Поступила в редакцию 02.06.2008 г.

Исследован рост колоний и пластинчатых выделений, возникающих при распаде метастабильных фаз, с помощью обобщенной континуальной модели дырочного газа и методом Монте-Карло. Показано, что морфология выделений качественно изменяется при понижении температуры и существенно зависит от начального состояния (присутствие границ зерен и критических зародышей равновесных фаз). Результаты моделирования сопоставлены с кинетикой роста эвтектических колоний и морфологиями распада метастабильного аустенита.

Метастабильные фазы, соответствующие локальным минимумам энергии Гиббса сплава, долгое время оставались за рамками теоретического анализа. Классическая термодинамика не рассматривает метастабильные состояния, поскольку они отсутствуют на равновесной фазовой диаграмме. В теории же спинодального распада (spinodal decomposition, SD [1]) изучались морфологии выделений в простых моделях, где появление метастабильных фаз невозможно. Промежуточные упорядоченные состояния, обусловленные конкуренцией процессов упорядочения и распада при действующем потенциале межатомного взаимодействия, впервые исследованы в [2] с помощью полуфеноменологических уравнений Онсагера, причем результаты несколько отличались от моделирования методом Монте-Карло (Monte-Carlo, MC) [3]. Позднее появились работы [4, 5] которые можно считать развитием идей Чена и Хачатуряна [2], однако кинетика распада метастабильных фаз осталась малоисследованной.

Между тем, изучение метастабильных фаз является актуальной задачей [6]. Во-первых, не всегда ясно, какие из множества интерметаллидов [7] являются стабильными фазами, а какие метастабильны и могут претерпевать распад при ускорении диффузии, например, в условиях облучения или интенсивной пластической деформации [8]. Промежуточные упорядоченные состояния обнаружены, в частности, в сплавах Al–Mn [9], Fe–Co [10], Ni–V [11], Pt–V [7], Ti–V [3], Au–Fe [12] и др. Во-вторых, при распаде метастабильных фаз могут формироваться микроструктуры с правильной морфологией выделений, придающие сплаву особые свойства (прочность, пластичность и т.п.). К превращениям этого типа может быть отнесен эвтектоидный распад в сплавах Cd–Sn, Ti–Mn, Ti–Cr, Ti–Ni [13]. Особый интерес

представляет распад метастабильного аустенита (неупорядоченный твердый раствор внедрения углерода в ГЦК-Fe), сопровождающийся ростом перлитных колоний, в результате чего изменяются свойства конструкционных сталей [14, 15].

В работе [16] с помощью уравнений диффузии исследован распад метастабильной упорядоченной фазы, спровоцированный границей зерна. Показано, что локальное понижение энергии упорядочения вблизи границы приводит к формированию цепочки эквидистантно расположенных выделений равновесных фаз, которые с течением времени прорастают в объем в форме полос одинаковой ширины. В настоящей работе более детально изучена кинетика роста колоний — как от границы зерна, так и от критических зародышей в объеме — с помощью этой модели и методом MC. Результаты континуальной модели и MC-моделирования сопоставлены с кинетикой роста эвтектических [17, 18] и эвтектоидных [14, 15] колоний.

РАСПАД МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ФАЗЫ В КОНТИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ

Формулировка модели

В термодинамике сплавов [19] вид фазовой диаграммы определен зависимостью энергии Гиббса смешения сплава $f(C_A, T)$ от состава и температуры. В модели регулярного твердого раствора, в предположении взаимодействия ближайших соседей, для $f(C_A, T)$ получено выражение

$$f(C_A, T)/kT = (\Psi/2)C_A C_B + \sum_{\sigma} C_{\sigma} \ln C_{\sigma}, \quad (1)$$

$$\sigma = A, B,$$

где $\Psi = Z(2\phi_{AB} - \phi_{AA} - \phi_{BB})/(kT)$ — безразмерная энергия смешения, $\phi_{\sigma\sigma'}$ — потенциалы межатомного взаимодействия, Z — координационное чис-

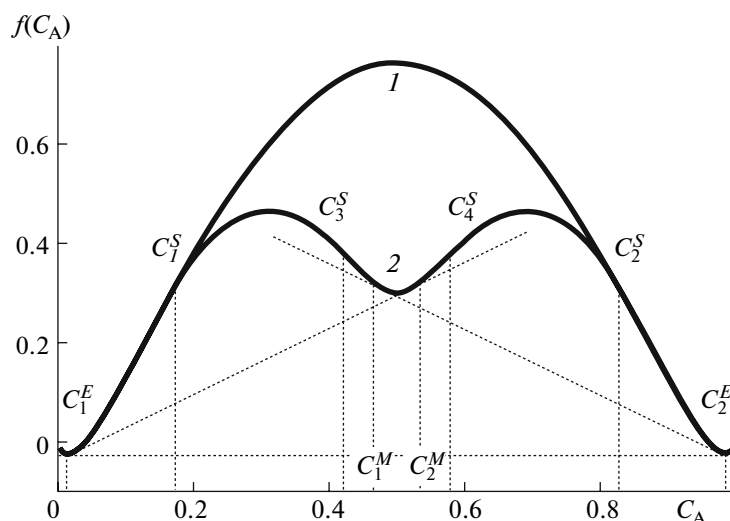


Рис. 1. Энергия Гиббса смешения сплава при $\Psi = 8.6$; $\Xi = 0$ (1), 5 (2); $C_{1,2}^E$, $C_{1,2}^M$ — пределы основного и метастабильного равновесия, $C_{1,2,3,4}^S$ — спиноды.

ло, $C_A + C_B = 1$. В этой модели распад на фазы обедненные и обогащенные одним из компонент реализуется при условии $\Psi > 4$. При фиксированной температуре распад развивается безактивационно в пределах выпуклого участка кривой $f(C_A)$ (рис. 1, кривая 1); точки перегиба C_1^S , C_2^S называются спинодами и задают условия потери устойчивости сплава. Равновесные пределы растворимости C_1^E , C_2^E определяются общей касательной к вогнутым участкам кривой $f(C_A)$ как абсциссы точек касания.

При дальнедействующих потенциалах поведение системы может существенно изменяться; в частности, различие энергий межатомных взаимодействий на различных координационных сферах может приводить к формированию метастабильных упорядоченных фаз [2]. Ограничимся простейшим случаем упорядочения типа В2, тогда в приближении среднего поля энтальпия на один атом равна:

$$H = \sum_{\sigma, n} E_{\sigma}^{(n)} C_{\sigma}^{(n)} / 4,$$

где $C_{\sigma}^{(n)}$, $E_{\sigma}^{(n)}$ — соответственно концентрации и энергии связи атомов сорта $\sigma = A, B$ в подрешетках $n = 1, 2$. Энергия связи вычисляется суммированием энергий взаимодействий с атомами “своей” и “чужой” подрешеток по всему объекту:

$$E_{\sigma}^{(n)}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma' = A, B} \sum_i \varphi_{\sigma\sigma'}^{(nm)}(\mathbf{q}_i) C_{\sigma'}^{(m)}(\mathbf{r} + \mathbf{q}_i). \quad (2)$$

Учитывая быстрое убывание потенциалов $\varphi_{\sigma\sigma'}^{(nm)}$ с расстоянием, в нулевом порядке разложения по $\mathbf{q}_i$ следуя [19] получаем для $f(C_A, T)$:

$$2f(C_A, T)/kT = \Xi \eta_A \eta_B + \Psi C_A C_B + \sum_{\sigma, n} C_{\sigma}^{(n)} \ln C_{\sigma}^{(n)}, \quad (3)$$

где $\eta_{\sigma} = (C_{\sigma}^{(1)} - C_{\sigma}^{(2)})/2$, $C_{\sigma} = (C_{\sigma}^{(1)} + C_{\sigma}^{(2)})/2$. Безразмерные энергии смешения и упорядочения Ψ и Ξ определяются соответственно суммой и разностью подрешеточных энергий смешения χ^0 , χ^+ отнесенных к тепловой энергии kT :

$$\Psi = (\chi^0 + \chi^+)/kT, \quad \Xi = (\chi^0 - \chi^+)/kT,$$

$$\chi^{0(+)} = 2\Phi_{AB}^{0(+)} - \Phi_{AA}^{0(+)} - \Phi_{BB}^{0(+)},$$

$$\Phi_{\sigma\sigma'}^0 = \sum_i \varphi_{\sigma\sigma'}^{(nn)}(\mathbf{q}_i), \quad \Phi_{\sigma\sigma'}^+ = \sum_i \varphi_{\sigma\sigma'}^{(nm)}(\mathbf{q}_i), \quad m \neq n$$

Степень упорядочения η_{σ} можно вычислить из уравнения Брэгга–Вильямса [20]:

$$\frac{(C_{\sigma} - \eta_{\sigma})(1 - C_{\sigma} - \eta_{\sigma})}{(C_{\sigma} + \eta_{\sigma})(1 - C_{\sigma} + \eta_{\sigma})} = \exp[-2\Xi\eta_{\sigma}]. \quad (4)$$

В случае $\Psi > \Xi > 4$ функция $f(C_A)$ имеет локальный минимум при $C_A = 0.5$, отвечающий метастабильному упорядоченному состоянию (рис. 1, кривая 2). Этот минимум ответствен за появление метастабильных пределов растворимости C_1^M , C_2^M и дополнительных спинов C_3^S , C_4^S .

На рис. 2 представлена диаграмма состояния, рассчитанная по формулам (3), (4). Сплошная линия отвечает условиям равновесия фаз, штриховые — потере устойчивости сплава. Вторая спино-

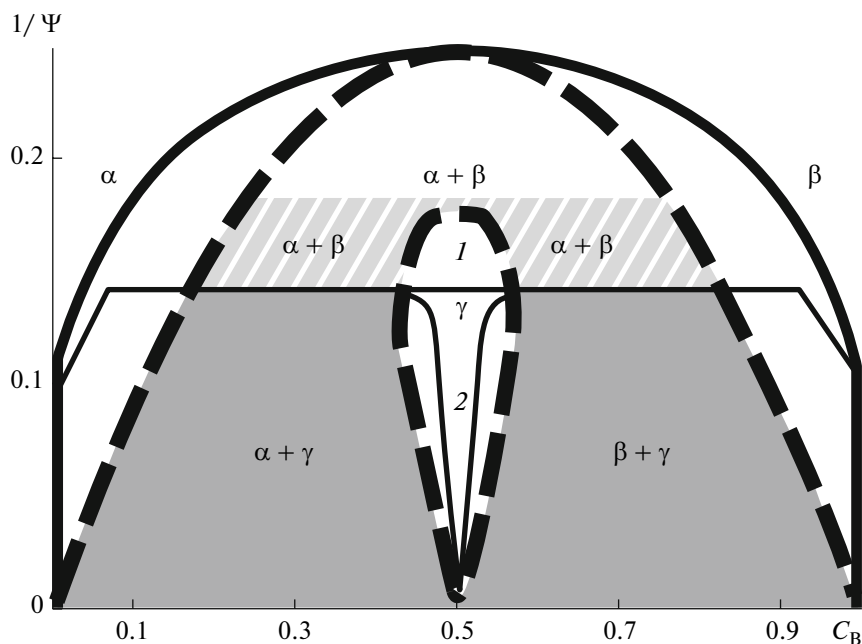


Рис. 2. Метастабильная фазовая диаграмма сплава с тенденцией упорядочения ($\Psi = 1.2\Xi$); 1 – область автокаталитического распада (колонии); 2 – область метастабильного равновесия.

дальше проходит выше кривой метастабильного равновесия, что приводит к качественному различию кинетики распада в областях 1 и 2 диаграммы.

Микроскопическая формулировка уравнений кинетики распада соответствующая приближенным термодинамическим формулам (3), (4) предложена ранее в [16] и представляет собой обобщение метода дырочного газа [21] на сплавы с тенденцией упорядочения. В этой модели исходным является основное кинетическое уравнение в приближении среднего поля для системы с вакансионным механизмом обмена:

$$\frac{dC_{\sigma}^{(n)}}{dt}(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^Z \omega_{\sigma}^{(m)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_l \rightarrow \mathbf{r}) C_{\sigma}^{(n)}(\mathbf{r}) C_{\sigma}^{(m)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_l) - \omega_{\sigma}^{(n)}(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}_l) C_{\sigma}^{(m)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_l) C_{\sigma}^{(n)}(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где $C_A^{(n)} + C_B^{(n)} + C_V^{(n)} = 1$, $C_V^{(n)}$ – концентрация вакансий в подрешетке n , $C_V^{(n)} \ll C_{\sigma}^{(n)}$, $\mathbf{a}_l$ – радиус-векторы ближайших соседей выделенного узла $\mathbf{r}$. Частоты скачков определены равенствами

$$\omega_{\sigma}^{(m)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_l \rightarrow \mathbf{r}) = \omega_{\sigma 0} \exp[(E_{\sigma}^{(m)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_l) - E_{\sigma}^S)/kT],$$

$$\omega_{\sigma}^{(n)}(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}_l) = \omega_{\sigma 0} \exp[(E_{\sigma}^{(n)}(\mathbf{r}) - E_{\sigma}^S)/kT].$$

По сути (5) выражает баланс вещества: изменение (в единицу времени) вероятности обнаружения атома сорта $\sigma = A, B$ в узле $\mathbf{r}$ складывается из вероятностей перехода атомов этого сорта из всех узлов ближайшего окружения в данный узел за вы-

четом вероятностей обратного перехода. Энергия атома в седловой точке E_{σ}^S принимается постоянной. Используя приближения локально-равновесного упорядочения, локального равновесия вакансий и плавного изменения концентраций на расстояниях порядка параметра решетки, можно привести уравнение (5) к виду [16]:

$$\frac{dC_A}{dt} = -\nabla \mathbf{J}_A, \quad (6)$$

$$\mathbf{J}_A = M \nabla \left[\ln \left(\frac{C_B^{(1)}}{C_A^{(1)}} \right) + \frac{(E_B^{(1)} - E_A^{(1)})}{kT} \right],$$

где M – обобщенная подвижность, зависящая от диффузионных подвижностей и концентраций атомов и вакансий в подрешетках. При этом для описания эволюции концентраций в области межфазных границ в разложениях энергий связи (2) по $\mathbf{q}_i$ необходимо удерживать члены второго порядка (первый порядок отсутствует в силу симметрии решетки):

$$E_{\sigma}^{(n)}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma' = A, B} \Phi_{\sigma\sigma'}^0 (C_{\sigma'}^{(n)} + R^2 \Delta C_{\sigma'}^{(n)}) + \Phi_{\sigma\sigma'}^+ (C_{\sigma'}^{(m)} + R^2 \Delta C_{\sigma'}^{(m)}), \quad m \neq n.$$

Малый параметр R , имеющий смысл эффективного радиуса взаимодействия атомов, считаем константой.

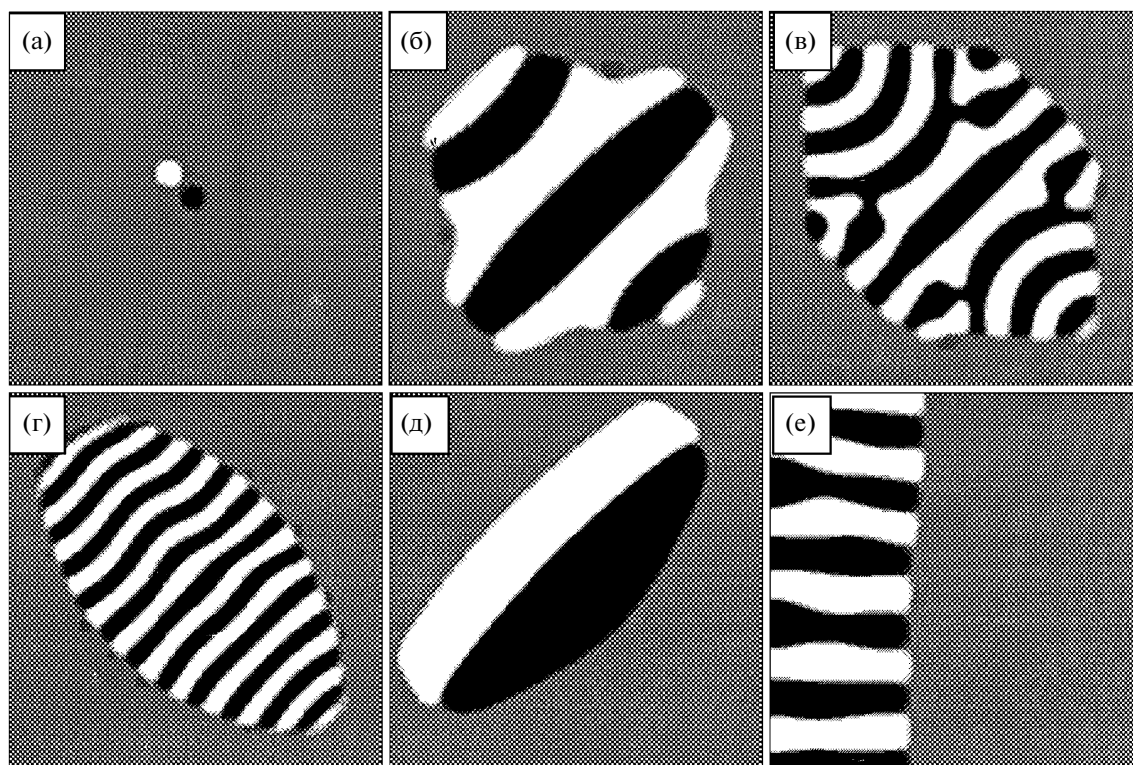


Рис. 3. Характерные морфологии выделений при распаде метастабильной фазы; а — начальное состояние, общее в случаях (б–д); $\Psi/\Xi = 1.2$ (б, в, д, е), 1.5 (г); $\Psi = 6$ (б, е), 6.6 (в), 7.8 (г), 7.2 (д); е — распад, спровоцированный понижением энергии упорядочения Ξ на 50% в приграничной области шириной $2R$.

Численное решение

Уравнение (6) решалось численно стандартным методом Рунге–Кутты на $2D$ -области размера $L \times L$, $L = 100R$ в предположении, что потоки атомов через границы квадрата отсутствуют.

В расчетах представленных на рис. 3б–д начальное состояние выбрано упорядоченным (γ) с малыми гауссовыми флуктуациями состава и двумя соприкасающимися зародышами α - и β -фаз (рис. 3а). В реальных системах такие зародыши могут возникнуть спонтанно, особенно вблизи дефектов решетки. Средний состав выбран близким к эквиаtomному, а температура достаточно низка, так что параметры сплава лежат в областях 1 или 2 фазовой диаграммы (рис. 2), где начальное состояние в отсутствие критических возмущений остается однородным и упорядоченным неограниченно долго. На рис. 3 фазы обедненные и обогащенные компонентом A обозначаются белым и черным, а упорядоченное состояние — серым цветом.

В области 1 фазовой диаграммы распад развивается автокаталитически: выделения каждой из фаз приводят к зарождению выделений другой фазы в своей окрестности. В результате возникает колония, состоящая из ламелей примерно одинаковой ширины λ , имеющих медленную эволю-

цию в сторону разрушения. Зависимость λ от температуры и отношения Ψ/Ξ имеет сложный характер. Так при $\Psi/\Xi = 1.2$ величина λ повышается с ростом температуры (сравним рис. 3б, в). Однако расчеты проведенные при $\Psi/\Xi = 1.5$ выявили немонотонный характер зависимости $\lambda(T)$. Во всех случаях в начале эволюции ламели ориентированы параллельно, однако в микроструктурах с $\lambda \gg R$ на более поздних стадиях наблюдается переход к дендритному росту (рис. 3в). В узкополосных микроструктурах фронт превращения более устойчив в отношении автокаталитического зарождения новых полос; типичная колония имеет эллипсоидальную форму и правильное строение (рис. 3г). Распад может быть спровоцирован также одним зародышем: в этом случае кольцевая структура, возникающая на начальной стадии, сменяется дендритным ростом.

При переохлаждении в область 2 фазовой диаграммы автокатализ выделений прекращается; одиночный зародыш остается в равновесии с γ -фазой, однако пара соприкасающихся зародышей развивается в двойную ламель (рис. 3д). Толщина ламели возрастает неограниченно, однако скорость утолщения с течением времени понижается, в то время как скорость удлинения ламели является постоянной. Такой тип распада можно назвать “игольчатый”.

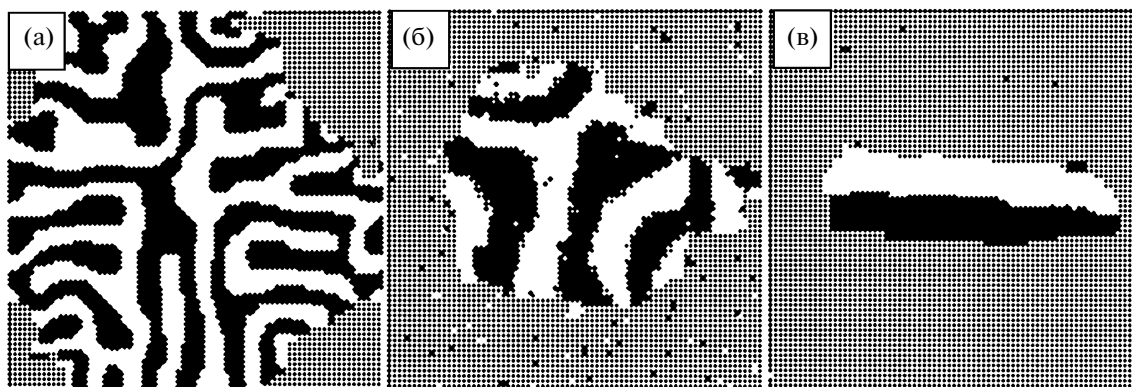


Рис. 4. Характерные морфологии выделений при распаде метастабильной фазы: результаты МС-моделирования; $\phi_{AA}^{(1)}/\phi_{AA}^{(2)} = 0.25$ (а), 0.09 (б, в); $-\phi_{AA}^{(1)}/kT = 0.5$ (а), 0.083 (б), 0.125 (в).

Как показано в [16, 22], при спиновом распаде существенна роль границ зерен (ГЗ), вблизи которых термодинамические свойства сплава могут локально изменяться. В частности, при понижении энергии упорядочения вблизи ГЗ, здесь развивается волновая стадия SD , и формируется цепочка выделений α - и β -фаз, которые со временем прорастают в объем зерна (рис. 3е) в виде ламелей одинаковой ширины. Формирование регулярной микроструктуры такого типа возможно как в области 1, так и в области 2 диаграммы состояния, однако в последнем случае требуется специальный подбор параметров (ширина приграничной области, амплитуда возмущения). Наконец, если $\nabla\P \neq 0$ вблизи ГЗ, это приводит к однородным сегрегациям, которые провоцируют распад γ -фазы без возникновения микроструктур.

Моделирование распада методом Монте-Карло

Кинетика распада АВ-сплава с ОЦК-решеткой исследовалась на квазидвумерной области ($75 \times 75 \times 1$ ячеек) с периодическими граничными условиями методом аналогичным [23]. В этой модели: 1) диффузия осуществляется посредством скачка вакансии в позицию $i = 1..Z$ одного из соседних с ней атомов; 2) вероятность скачка $\Gamma_{\sigma}^{(i)} \sim \exp[-\Delta E_{\sigma}^{(i)}/kT]$, $\sigma = A, B$; причем энергия активации скачка равна разности между энергиями атома в седловой точке и в основном состоянии $\Delta E_{\sigma}^{(i)} = E_{i\sigma}^S - E_{i\sigma}^{(0)}$, а сумма вероятностей всех скачков на одном шаге метода нормируется на единицу (BKL-алгоритм [24]); 3) энергия в седловой точке принимается независимой от конфигурации $E_{i\alpha}^S = E^S = \text{const}$; энергия в основном состоянии равна сумме энергий парных взаимодействий

по нескольким координационным сферам: $E_{i\sigma}^{(0)} = \sum_{K, \sigma'} \phi_{\sigma\sigma'}^{(K)} N_{\sigma'}^{(iK)}$, где $\phi_{\sigma\sigma'}^{(k)}$ — энергия взаимодействия атомов сортов σ и σ' удаленных на расстояние K -ой координационной сферы, содержащей $N_{\sigma'}^{(iK)}$ атомов сорта σ' . Число независимых параметров модели $\phi_{\sigma\sigma'}^{(K)}$ сокращено до двух ($\phi_{AA}^{(K)} = \phi_{BB}^{(K)}$, $\phi_{AB}^{(K)} = 0$; $K = 1, 2$), что достаточно для анализа общих закономерностей распада метастабильной фазы. Отождествление с параметрами континуальной модели производится по правилу: $\Psi = -2[8\phi_{AA}^{(1)} + 6\phi_{AA}^{(2)}]/(kT)$; $\Xi = 2[8\phi_{AA}^{(1)} - 6\phi_{AA}^{(2)}]/(kT)$.

На рис. 4 представлены характерные морфологии распада метастабильной фазы при введении пары соприкасающихся зародышей α - и β -фаз в начальное состояние, параметры которого соответствуют областям 1 либо 2 фазовой диаграммы (рис. 2). Атомы сортов А и В обозначены черным и белым цветом; сплошность изображения достигнута отображением двух слоев решетки. Видно, что результаты моделирования качественно подобны предсказаниям континуальной модели: при умеренных температурах имеет место автокатализ ламелей (рис. 4а, б), ширина ламелей сложным образом зависит от T и Ψ/Ξ , в области низких T наблюдается переход к игольчатому распаду (рис. 4в). Однако при МС-моделировании не удалось получить правильной морфологии ламелей подобной рис. 3г; типичная колония имеет радиально-перистое строение (рис. 4а). Условия начала распада несколько смещены в область низких температур по сравнению с диаграммой состояния континуальной модели (рис. 2). Кроме того, для игольчатого распада можно ожидать зарождения новых полос при больших временах выдержки в результате тепловых флуктуаций состава.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Модель предсказывает возможность распада метастабильных упорядоченных фаз (Al–Mn, Ti–V и др.) по механизму роста колоний, а также может оказаться полезной при анализе физически близких явлений, таких как эвтектические [17, 18] и эвтектоидные превращения [14, 15]. В работах [17, 18] показано, что фронт роста эвтектической колонии может испытывать неустойчивость; стационарный рост наблюдается в оптимальном диапазоне λ . Также из эксперимента известно, что пластины в цилиндрических колониях ледебурита ориентируются по нормали к фронту роста колонии [25] подобно рис. 3в, 4а.

Качественное сходство явления с кинетикой распада метастабильной фазы обусловлено сходной термодинамикой превращения. В обоих случаях конкурируют два термодинамических фактора, один из которых обеспечивает устойчивость гомогенного состояния относительно малых флуктуаций состава, а второй способствует распаду на равновесные фазы, в результате чего энергия Гиббса понижается. Если в процессах солидификации существует перепад температуры на фронте роста колонии, то при распаде метастабильной упорядоченной фазы локальный минимум $f(c)$ обусловлен тенденцией упорядочения вблизи эквиатомного состава.

Возможность спонтанного формирования критических зародышей не описывается континуальной моделью, однако если зародыши α - и β -фаз введены в начальное состояние, то в области их контакта возникают отличные от нуля потоки атомов, приводящие к развитию ламелей. Заметим, что при анализе эвтектических колоний 1) первоначальное значение λ задавалось периодическим распределением концентраций на границе области моделирования; 2) развитие колоний от выделений в объеме не рассматривалось, в связи с чем автокатализ ламелей проявлялся только при их расщеплении в условиях дендритного роста.

Полученные при моделировании морфологии выделений подобны также распаду метастабильного аустенита в сталях [14, 15]. При отжиге аустенита на температурах от 727 до 500°C образуются последовательно перлит, сорбит и троостит с уменьшающимся инкубационным периодом, причем толщина пластин понижается от 1 мкм (перлит) до 0.1 мкм (троостит). При отжиге на температурах ниже 500°C обедненный углеродом аустенит превращается в феррит по сдвиговому механизму. При этом в области температур 350°C < T < 500°C образуется верхний бейнит с перистой микроструктурой, а при T < 350°C – игольчатый нижний бейнит. Границы зерен приводят к самостоятельным морфологиям, известным как полигональный и видманштеттов феррит, причем последний возникает при повышенных T .

Можно видеть, что представленная модель, учитывающая конкуренцию двух термодинамических факторов Ψ и Ξ , привела к качественно близкой картине роста колоний и игольчатых выделений, что свидетельствует о физической общности и распространенности явления.

Модель предсказывает возникновение правильных перлито-подобных (рис. 3б, г) и дендритных микроструктур (рис. 3в) при охлаждении сплава в область 1 фазовой диаграммы, причем при выборе $\Psi/\Xi = 1.2$ межпластиночное расстояние λ уменьшалось с понижением T (сравним рис. 3б, в). Наблюдаемая в эксперименте смена структур перлита, сорбита и троостита и форма колоний близкая к сферической свидетельствуют о наличии автокатализа пластин, который возможен лишь при отсутствии метастабильного равновесия между аустенитом и продуктами распада. Дальнейшее понижение T приводит в область 2 фазовой диаграммы, где автокатализ ламелей прекращается и наблюдается игольчатый распад (рис. 3д), подобный бейнитному превращению. Различие областей 1 и 2 фазовой диаграммы, обусловленное несовпадением вершин спинодали и кривой метастабильного равновесия, должно быть общей особенностью многих метастабильных систем, имеющих локальный минимум $f(c)$. Ламели ориентированные по нормали к границе зерна (рис. 3е) подобны видманштеттову ферриту. Выпадение фазы на ГЗ, подобное полигональному ферриту, может быть вызвано зернограницными сегрегациями.

В отличие от уравнений диффузии, МС-моделирование учитывает спонтанные флуктуации состава, что приводит к менее правильной морфологии выделений по сравнению с континуальной моделью. Отсюда следует, что правильные колонии перлита зарождаются в относительно гомогенной среде, в то время как сильная гетерогенность нарушает регулярность ламелей. Это утверждение согласуется с технологией получения зернистого перлита из неоднородного состояния [15]. Результаты МС-моделирования и континуальной модели должны сближаться для далекодействующих потенциалов, которые могут быть получены для конкретных систем из первопринципных расчетов [26].

Таким образом, метастабильные фазы претерпевают распад по механизму зарождения и роста перлито-подобных колоний либо игольчатых выделений из областей с нарушенной гомогенностью (границы зерна, критические зародыши равновесных фаз). Ширина ламели в колониях определяется процессом автокатализа, зависит от температуры и параметров межатомного взаимодействия. Автокатализ ламелей существует в ограниченном диапазоне температур. При низких температурах критические флуктуации состава приводят к игольчатому распаду.

Автор выражает сердечную признательность директору ЗАО “Институт квантового материаловедения”, профессору Ю.Н. Горностыреву за содержательные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Cahn J.W.* // Acta. Metall. 1961. V. 9. P. 795.
2. *Chen L.Q., Khachatryan A.G.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 4681.
3. *Reinhard L., Turchi P.E.A.* // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 120.
4. *Jun Ni., Binglin Gu.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1998. V. 10. P. 3523.
5. *Jun Ni, Ashino T., Iwata S.* // Acta Materialia. 2000. V. 48. № 12. P. 3193.
6. *Бражкин В.В.* // Успехи физ. наук. 2006. Т. 176. № 7. С. 745.
7. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Справочник: в 3 тт./Под ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 2000.
8. *Ермаков А.Е.* // Физика металлов и материаловедение. 1991. № 11. С. 4.
9. *Тейтель Е.И., Уймирн М.А., Ермаков А.Е. и др.* // Там же. 1990. № 8. С. 83.
10. *Woodcock T.G., Hermann R., Löser W.* // Calphad. 2007. V. 31. № 2. P. 256.
11. *Notthoff C., Feuerbacher B., Franz H. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 1038.
12. *Chen H., Anderson J., Ohshima K. et al.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 2342.
13. *Дубинин Г.Н.* Конструкционные, проводниковые и магнитные материалы (электроматериаловедение). М.: Наука, 1973.
14. *Счастливцев В.М., Мирзаев Д.А., Яковлева И.Л. и др.*/Перлит в углеродистых сталях. Екатеринбург: УрО РАН, 2006.
15. Металловедение и термическая обработка стали и чугуна: Справ. изд. В 3-х т./М.Л. Бернштейн, Г.В. Курдюмов, В.С. Меськин и др./Под общ. ред. А.Г. Рахштадта, Л.М. Капуткиной, С.Д. Прошкиной, А.В. Ступова. Т. 2. Строение стали и чугуна. М.: Интернет Инжиниринг, 2005.
16. *Разумов И.К.* // Инж.-физ. журн. 2008. Т. 81, № 4. С. 789.
17. *Datye V., Langer J.S.* // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. P. 4155.
18. *Apel M., Boettger B., Diepers H.J., Steinbach I.* // J. Cryst. Growth. 2002. V. 237–239. P. 154.
19. *Кристиан Дж.* Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978.
20. *Couyet J.-F., Plapp M., Dieterich W. and Maass P.* // Advances in Physics. 2003. V. 52. № 6. P. 523.
21. Процессы взаимной диффузии в сплавах / Под ред. К.П. Гурова. М.: Наука, 1973.
22. *Razumov I.K., Gornostyrev Yu.N., Yermakov A.Ye.* // J. of Alloys and Compounds. 2007. V. 434–435. P. 535.
23. *Soisson F., Bardu A., Martin G.* // Acta Mater. 1996. V. 44. № 9. P. 3789.
24. *Bortz A.B., Kalos M.H. and Lebowitz J.L.* // J. Comp. Phys. 1975. V. 17. P. 10.
25. *Ольшанецкий В.Е.* // МиТОМ. 2008. № 1. С. 6.
26. *Рашиников В.Ф., Морозов А.А., Урцев В.Н., Горностырев Ю.Н.* // Сталь. 2007. V. 2. С. 104.