

УДК 669.17

**ИЗУЧЕНИЕ ЯВЛЕНИЯ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ  
ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ, РАСТУЩИХ ИЗ  
МЕТАЛЛИЧЕСКИХ 50% ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РАСПЛАВОВ  
В ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР НИЖЕ ТОЧКИ КЮРИ**

**Ю.А. Байков, Н.И. Петров**

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева  
(РХТУ им. Д.И. Менделеева)  
125047, Москва, Россия, Миусская пл., 9*

*Аннотация.* Использована схема переходной двухфазной зоны в пространстве концентраций, обусловленной действием механизма спонтанных флуктуаций концентраций частиц твердого состояния с ограниченным спектром их изменения. Используются стационарные кинетические уравнения, описывающие структуру переходной двухфазной зоны, расположенной на границе двух массивных фаз двухкомпонентный металлический расплав-кристалл. Показано, что в случае конечных переохлаждений системы двухкомпонентный металлический расплав-кристалл образуется полностью разупорядоченная кристаллическая фаза в той области температур, где согласно представлениям классической термодинамики, должна расти полностью упорядоченная в смысле параметра дальнего порядка двухкомпонентная система. Рассмотрен случай кристаллов с простой кубической решеткой, растущих из 50% металлических расплавов двухкомпонентных сплавов. Показано, что в случае полного разупорядочения кристаллической фазы кинетика ее роста испытывает скачок на конечную величину, пропорциональную квадрату параметра дальнего порядка.

*Ключевые слова:* переходная двухфазная зона, двухкомпонентный металлический расплав, параметр дальнего порядка.

Использование флуктуационной теории нормального роста металлических одно- и двухкомпонентных кристаллов из соответствующих расплавов в области малых переохлаждений системы расплав-кристалл, изложенной в работах [1-3], позволило параллельно исследовать процессы разупорядочения вышеуказанных кристаллов в области температур, где, согласно представлениям классической термодинамики, должна расти полностью упорядоченная кристаллическая матрица.

Подобие модели переходной двухфазной зоны, расположенной на стыке двух соприкасающихся сплошных макрофаз – металлический двухкомпонентный кристалл и расплав - и образованной за счет механизмов спонтанных равновесного типа флуктуаций концентраций частиц (мономеров роста) в моноатомной толщине слоев, и модели шероховатой ступени с изломами кристалла Косселя позволило с одной стороны описать структуру подобной зоны, а с другой стороны дало возможность описать уникаль-

ное явление - разупорядочение двухкомпонентной кристаллической матрицы с простой кубической решеткой.

Сохранение ступенчатого вида границы раздела фаз металлический расплав-кристалл в области конечных переохлаждений сказывается на характере перехода параметра дальнего порядка от некоторых конечных значений непрерывным образом к нулю. Поскольку этот переход происходит при значительных переохлаждениях системы двухкомпонентный расплав-кристалл, имеют место кинетические особенности самого процесса разупорядочения кристаллической металлической двухкомпонентной фазы в области температур, меньших температуры Кюри  $T_c$ . На первых стадиях изучения процесса разупорядочения двухкомпонентных металлических кристаллов в модели переходной двухфазной зоны, подобной поверхности кристалла Кесселя, было предположено, что частицы двухкомпонентного расплава (мономеры роста в переходной зоне) при их переходе в кристаллическое состояние с одинаковой (постоянной) частотой совершают подобные переходы (см. [4,5]).

Наиболее полным образом проблема коллективного взаимодействия частиц расплава и кристалла (в модели переходной двухфазной зоны мономеров роста, принадлежащих разным агрегатным состояниям и разным сортам двухкомпонентной системы) может быть описана с учетом зависимости частоты присоединения этих частиц (мономеров роста) в изломах шероховатой поверхности раздела двухкомпонентных фаз – расплава и кристалла от структуры поверхности и температуры.

Задача описания процессов обмена мономерами роста между обеими соприкасающимися массивными фазами – двухкомпонентным металлическим расплавом и двухкомпонентным кристаллом с простой кубической решеткой – решалась с помощью стационарных кинетических уравнений, которые в модели переходной двухфазной зоны в пространстве концентраций мономеров роста обоих агрегатных состояний системы двухкомпонентный металлический расплав 50% сплавов - кристалл позволяли получить замкнутую систему трансцендентных математических уравнений. Эта система с одной стороны описывала стационарную структуру вышеупомянутой переходной двухфазной зоны, а с другой стороны позволяла объяснить значение критической температуры  $T_k$  (критического переохлаждения системы двухкомпонентный расплав-кристалл), при которой происходит полное разупорядочение двухкомпонентной кристаллической фазы в смысле параметра дальнего порядка. Кинетика самого процесса кристаллизации двухкомпонентного металлического расплава также описывалась в модели переходной двухфазной зоны той же совокупностью функций распределения мономеров роста по конечной протяженности моноатомной толщины слоям той зоны, что фигурировала в соответствующей системе трансцендентных уравнений.

Было установлено, что при обычных условиях процессов кристаллизации 50% металлических расплавов (частотах колебаний частиц в жидких расплавах и в металлических кристаллах, энергиях связей частиц в различных или одинаковых агрегатных состояниях и т.д.) температура полного разупорядочения двухкомпонентного кристалла  $T_k$  находится ниже температуры кинетического равновесия системы двухкомпонентный металлический расплав-кристалл  $T_e$  и тем самым ниже температуры разупорядочения Кюри  $T_c$ , т.е.  $T_k < T_e < T_c$ . Это доказывает, что при учете зависимости частоты присоединения мономеров роста к кристаллической фазе из жидкого расплава 50% сплавов процесс разупорядочения имеет место в твердом состоянии. Этот процесс

разупорядочения двухкомпонентной металлической кристаллической фазы сопровождается кинетическим эффектом: средняя скорость роста двухкомпонентной кристаллической фазы из расплава 50% - металлических сплавов испытывает в точке разупорядочения – скачок на конечную величину, пропорциональную квадрату параметра дальнего порядка. Этот эффект был в свое время назван кинетическим фазовым переходом, впервые обнаруженным и исследованным при росте двухкомпонентных кристаллов из соответствующих паро-газовых смесей [6,7].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Baikov Yu.A., Zelenev Yu.V., Haubenreisser W., Pfeiffer H.* Phys.stat.sol. (a), v.61, 1980, p.435-446.
2. *Саркисов П.Д., Байков Ю.А., Мешалкин В.П.* ДАН РФ, 2003, т.390, №6, с.763-768.
3. *Саркисов П.Д., Байков Ю.А., Мешалкин В.П.* Математическое моделирование кристаллизации одно- и двухкомпонентных металлических расплавов. Москва, Физматлит, 2003, 384 с.
4. *Chistyakov Yu.D., Baikov Yu.A., Schneider H.G., Ruth V.* Crystal Research and Technology, v.20, №8, 1985, p.1007-1014.
5. *Chistyakov Yu.D., Baikov Yu.A., Schneider H.G., Ruth V.* Crystal Research and Technology, v.20, №9, 1985, p.1149-1156.
6. *Lewis J., Chernov A. A.* J. Phys. Chem. Solids, 1967, v.28, p.2185
7. *Чернов А.А.* ЖЭТФ т. 53, 1967, с. 2090 – 2099

#### **THE ORDER-DISORDER PROCESSES IN BINARY CRYSTALS GROWING FROM THE 50% - BINARY METALLIC MELTS ARE STUDIED WITHIN TEMPERATURE REGION BELOW CURIE ORDERING POINT**

**Yu. Baikov, N. Petrov**

*D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia  
9, Miusskaya Pl., 125047 Moscow, Russia*

*Abstract.* Diphasе zone's scheme is used in the case of limited spectrum spontaneous solid state particles concentration fluctuations. There have been used stationary kinetic equations, describing diphasе transitional zone's structure in the binary melt-crystal system. It has been shown in the case of finite supercoolings region completely disordered crystalline phase was formed. This is within temperature region where according to classical thermodynamics a quite ordered crystalline phase should be grown. This concerns a far order parameter for crystalline binary systems which have simple cubic lattice. It has been shown in the case of full disordering the binary crystalline phase kinetics had peculiarity namely: a mean crystallization velocity of binary crystals did some gap proportional to square degree of the far order parameter.

*Keywords:* diphasе transitional zone, far order parameter, order-disorder transformation.