

УДК 517, 517.9, 536

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ И НЕРАВНОВЕСНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Е. В. Радкевич^{1,*}, О. А. Васильева^{2,**}, М. И. Сидоров^{3,***}

Представлено академиком РАН В.В. Козловым 16.07.2019 г.

Поступило 05.08.2019 г.

Построена модель реконструкции начальной стадии кристаллизации бинарных сплавов как неравновесного фазового перехода, механизмом которого является диффузионное расслоение. Проведены численные эксперименты самовозбуждения однородного состояния управлением краевым условием охлаждения расплава.

Ключевые слова: кристаллизация бинарных сплавов, неравновесный фазовый переход, диффузионное расслоение, реконструкция начальной стадии процесса, самовозбуждение однородного состояния.

DOI: <https://doi.org/10.31857/S0869-56524896545-551>

ВВЕДЕНИЕ

Работа посвящена численному анализу модификации модели кристаллизации металлов, предложенной в [1] (см. также [2]). Новизна исследуемой модели заключается в том, что моделирование проводится одновременно на нескольких масштабных уровнях, от микро до макро. Хотя к настоящему времени экспериментальные исследования позволили установить многие детали явления кристаллизации металлов, но общего теоретического представления об этом процессе пока не существует. Основной причиной такого положения дел является сложность исследуемого феномена, выражающаяся в необходимости учитывать как процессы, происходящие на уровне атомов и их комплексов (микромасштаб), так и процессы, протекающие на макроуровне (модель сплошной среды).

Модель, используемая в настоящей работе, основана на представлении о пространстве кристаллизующегося сплава как о пористой среде, распространение возмущений в которой описывается уравнениями типа Био. Кристаллизующийся сплав представляется как возникающая и растущая подвижная пористая структура. Появление такой структуры и её рост про-

исходят в ходе кристаллизации. Свойства пористой структуры формулируются с помощью модификации (см. [1, 2]) модели Био [5] насыщенной пористой среды. Микроуровень ликвации описывается расширением модели Кана–Хилларда [6, 7] спинодального распада с конвекцией, моделирующей диффузионное расслоение. При этом в модель вводится ещё один параметр, так называемая усадка (точное определение см. ниже), которая характеризует процесс образования пустот при кристаллизации твёрдой фазы. Этот параметр имеет как физическое, так и технологическое значение, и для его описания вводится специальное макроуравнение типа закона сохранения. Показана возможность получения различных режимов кристаллизации при изменении параметров. Многомерный вариант предполагается изучить в последующих публикациях, используя многопроцессорные вычислительные комплексы. Наша задача (по аналогии с диаграммой состояний) — сформулировать модель в терминах фазового пространства.

В рамках настоящей работы в качестве модельного объекта выберем рассмотренный в [1] процесс кристаллизации двухкомпонентной системы (сплава) с эвтектикой. Обозначим компоненты расплава как A и B . При этом переходить в твёрдое состояние может только один компонент B . Формулировка модели предполагает, что модель должна описывать формирование межфазных границ, для управления которыми вводится ряд параметров, имеющих в том числе и технологическую интерпретацию, а эволюция системы описывается изменением во времени следующих функций от пространственной переменной: w_s — осреднённая скорость смещения твёрдой фазы; w_l — осреднённая скорость

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

²Национальный исследовательский Московский государственный строительный университет

³Инжиниринговый центр мобильных решений, МИРЭА — Российский технологический университет, Москва

*E-mail: evrad07@gmail.com

**E-mail: vasiljeva.ovas@yandex.ru

***E-mail: mihail.sidorov0213@gmail.com

конвекции жидкой фазы; z — усадка; c — молярная концентрация компонента B в жидкой фазе; T — температура; P — поровое давление в жидкой фазе.

Усадка $z = \frac{V - V_s - V_l}{V}$, где V — общий исходный объём системы, V_s и V_l — текущие объёмы твёрдой и жидкой фаз соответственно. Наша модель описывает процесс неравновесной кристаллизации сплава, который относительно быстро поместили в достаточно низкотемпературную среду. Вследствие этого возникает режим дальнейшего отвода тепла из сплава, и этим режимом можно управлять, влияя на характер кристаллизации. Причиной образования твёрдой фазы считается наличие зоны нестабильного состояния вещества в системе, которое возникает вследствие концентрационного переохлаждения. В этой нестабильной зоне возникает явление так называемого спинодального распада [8] с последующей ликвацией. Вследствие этого в расчётах мы будем визуализировать линии уровня функции c , считая, что при $c > c_{cr}$ имеет место преимущественно “твёрдая” фаза, c_{cr} является некоторым пороговым значением концентрации, при котором наша система неустойчива. Параметры процесса: $q = \frac{m_A}{m_B}$, где m_A обозначает общую массу компонента A , m_B обозначает общую массу компонента B ; положим $q = 0,25$; $Q = \frac{M_A}{M_B}$, где M_A , M_B — атомные массы компонентов A и B соответственно; положим $Q = 1,75$; $R = \frac{m_B}{\rho_s V}$, V — общий исходный объём системы; положим $R = 0,74$; c — молярная концентрация компонента B в жидкой фазе; заметим, что величина $y(c) = \frac{qc}{Q(1-c)}$ представляет собой массовую долю компонента B в жидкой фазе по отношению к общей массе компонента B , т.е. $y(c) = \frac{m_B^l}{m_B}$; $\rho_l(c, z)$ — плотность жидкой фазы, определяется как масса жидкой фазы m^l , делённая на объём V^l , занимаемый жидкой фазой; учитывая, что $m^l = m_A + m_B^l = m_B(y(c) + q)$, а $V^l = V - zV - V^s$, где z — усадка, V^s — объём, занимаемый твёрдой фазой, $V_s = \frac{m_B(1-y(c))}{\rho_s} = RV(1-y(c))$, получаем выражение для приращения энтальпии как функции T , S , c и z .

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Наша задача — построение потенциала Гинзбурга—Ландау для начальной стадии разрушения

конструкционного материал в форме свободной энергии Гиббса—Гельмгольца. Начнём с анализа термодинамических соотношений. Переход к кристаллизации отвечает отбору избыточной тепловой энергией ламинарного расплава. Таким образом, энергией деградации расплава (его кристаллизации) является отобранная при охлаждении тепловая энергия. Глобальную неоднородность системы можно характеризовать как неоднородное распределение энтальпии по расплаву

$$\Delta H = TdS + V_l dP + \psi dl.$$

Вклад ψdl упругой деформации твёрдой фазы (при тепловом ударе, см. [4, 12]) для простоты записан усреднённо одномерным. Тогда уравнение состояния упруго деформированной твёрдой фазы — закон Гука: $\psi = E(T, z)\epsilon$, где $E(T, z)$ — модуль Юнга, относительное удлинение $\epsilon = \frac{l - l_0}{l}$. Усреднённый линейный размер $l = (V_s)^{1/3}$ твёрдой фазы (усреднённая длина твёрдой фазы), где объём твёрдой фазы $V_s = (V_0(z + R(1 - y(c))))^{1/3}$. Отметим, что при фиксированном объёме при возрастании объёма пустот (усадки) твёрдое тело становится мягче: $\partial_z E(T, z) < 0$.

В фазовом пространстве на многообразии локального равновесия приращение энтальпии есть полный дифференциал. Для критических явлений с избыточной энергией [4], таких как ламинарно-турбулентный переход [10], конвективная неустойчивость Рэлея—Бенара [11], разрушение конструкционного материала [12], многообразие локального равновесия определяется соответствующей адиабатой. Что будет в рассматриваемом случае? Здесь

$$\epsilon = \frac{(z + R(1 - y(c)))^{1/3} - (R(1 - y(c_0)))^{1/3}}{(z + R(1 - y(c)))^{1/3}}.$$

Отсюда

$$\psi dl = \frac{1}{3}(V_0)^{1/3} E(T, z) \times \frac{(z + R(1 - y(c)))^{1/3} - (R(1 - y(c_0)))^{1/3}}{(z + R(1 - y(c)))} (dz - Ry'(c)dc)$$

и

$$\Delta H = d(T(S - S_0) + V_l(P - P_0)) - (S - S_0)dT + (P - P_0)V_0(dz - Ry'(c)dc) + \frac{1}{3}(V_0)^{1/3} E(T, z) \times \frac{(z + R(1 - y(c)))^{1/3} - (R(1 - y(c_0)))^{1/3}}{(z + R(1 - y(c)))} (dz - Ry'(c)dc).$$

Положим $Y_s = z + R(1 - y(c))$, тогда

$$G_s = \int_{R(1-y(c_0))}^{z+R(1-y(c))} \frac{Y_s^{1/3} - (Y_s^0)^{1/3}}{Y_s} dY_s =$$

$$= 3((z + R(1 - y(c)))^{1/3} - (R(1 - y(c_0)))^{1/3}) -$$

$$- (R(1 - y(c_0)))^{1/3} \ln\left(\frac{z + R(1 - y(c))}{R(1 - y(c_0))}\right).$$

Будем считать, что $\beta = \frac{\partial E(T, z)}{\partial z}$, $\kappa = \frac{\partial E(T, z)}{\partial T}$ — константы. Отсюда

$$\Delta H = d(T(S - S_0) + V_l(P - P_0) + E(T, z)G_s) -$$

$$- (S - S_0)dT + (P - P_0)V_0(dz - Ry'(c)dc) -$$

$$- G_s(\beta dT + \kappa dz).$$

Уравнение состояния

$$(S - S_0) + \beta G_s = 0. \quad (1)$$

Отсюда

$$S = S(z, c) = -\beta(3(z + R(1 - y(c)))^{1/3} -$$

$$- (R(1 - y(c_0)))^{1/3} \ln(z + R(1 - y(c))))).$$

Тогда

$$\Delta H = d(T(S - S_0) + V_l(P - P_0) + E(T, z)G_s) +$$

$$+ (P - P_0)V_0(dz - Ry'(c)dc) - G_s \kappa dz.$$

Функция $S(Y_s)$ монотонно возрастает на интервале $Y_s > Y_s^0$, что позволяет разрешить уравнение (1) относительно Y_s . Отсюда находим

$$z + R(1 - y(c)) = K(S - S_0),$$

$$S > S_0, \quad z + R(1 - y(c)) > Y_s^0.$$

Таким образом, возникает необходимое условие возрастания энтропии в расплаве в лабильной зоне (при зарождении затвердевания расплава):

$$S > S_0. \quad (2)$$

Отметим, что в первоначальном исследовании конструируемой нами модели кристаллизации [1] при формальном введении аналога потенциала Гинзбурга—Ландау в оператор Кана—Хилларда мы получили возрастание энтропии в лабильной зоне. Из (1) следует, что

$$c = \frac{Q\left(1 - \frac{1}{R}(K(S - S_0) - z)\right)}{Q\left(1 - \frac{1}{R}(K(S - S_0) - z)\right) + q}, \quad S > S_0. \quad (3)$$

Тогда

$$\Delta H = d(T(S - S_0) + V_l(P - P_0) + \beta T G_s) +$$

$$+ K'(S - S_0)((P - P_0)V_0 + \kappa G_s(K(S - S_0)))dS$$

есть полный дифференциал

$$\Delta H = d(T(S - S_0) + V_l(P - P_0) + \beta T G_s),$$

если выполнено второе уравнение состояния

$$(P - P_0)V_0 + \kappa G_s(K(S - S_0)) =$$

$$= (P - P_0)V_0 + \kappa z \frac{K(S - S_0)^{1/3} - (Y_s^0)^{1/3}}{K(S - S_0)} = 0,$$

определяющее поровое давление

$$P - P_0 = -\frac{\kappa}{V_0} z \frac{K(S - S_0)^{1/3} - (Y_s^0)^{1/3}}{K(S - S_0)}. \quad (4)$$

Таким образом, при справедливости двух уравнений состояния (на многообразии M_{sol}) приращение энthalпии есть полный дифференциал и на многообразии M_{sol} в фазовом пространстве определена функция $H_{sol} = T(S - S_0) + V_l(P - P_0) + \beta T G_s$, которая является приращением энthalпии на многообразии локального равновесия.

ВЫБОР МОДЕЛИ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

Для конструирования фазового перехода мы прежде всего должны построить аналог потенциала Ландау—Гинзбурга (удельную свободную энергию Гиббса). Построение опирается на классическую модель механики сплошной среды. Перейдём к детальной математической формулировке одномерной модели [1]. Пусть u обозначает осреднённое смещение твёрдой фазы, т.е. $w_s = \partial_t u$, $w = w_l - w_s$, а v обозначает осреднённое смещение жидкой фазы относительно твёрдой фазы, т.е. $w = \partial_t v$. Тогда система уравнений, выведенная из соответствующей системы трёхмерных уравнений в [5], при некоторых упрощающих предположениях выглядит следующим образом:

$$u_t = w_s, \quad v_t = w, \quad (5)$$

$$\rho(w_s)_t + \rho_l w_t = [(\lambda + 2\mu)u_x + \alpha P]_x + \rho g,$$

$$\rho_l (w_s)_t + \rho_{add} w_t = -Dw + P_x + \rho_l g + \epsilon v_{xx},$$

$$(\rho_l)_t + (\rho_l w)_x + \rho_s (w_s)_x = 0,$$

где ρ_s — плотность твёрдой фазы, в целях нормировки примем $\rho_s = 1$; ρ — параметр плотности системы из модели Био, который характеризует величину усреднённой кинетической энергии перемещения твёрдого каркаса пористой среды, положим $\rho = 2,5$; ρ_l — плотность жидкой фазы, $\rho_{add}(c, z)$ — плотность так называемой присоединённой массы из модели Био, которая характеризует дополнительный вклад в кинетическую энергию системы, возникающий из-за различия поля микроскоростей

в порах и поля усреднённой макроскорости; для этой величины воспользуемся оценкой из [1]

$$\rho_{\text{add}} = \frac{\beta(1-z)^{1/3}\rho_l(c, z)}{(1-y(c))^{1/3}},$$

положим $\beta = 0,55$; g — эффективная сила тяжести, действующая в пористой среде, положим $g = -\frac{1}{20}$; $D(c, z)$ — коэффициент силы межфазного трения, для этой величины также воспользуемся оценкой из [1], $D(c, z) = \frac{e^{-1/T}(1-e^{-1/T})\Gamma}{(1-y(c))^{2/3}}$, $\Gamma = 5$:

$$(\rho_s + (1-c)\rho_l)\frac{d}{dt}S + \eta(T)e^{-\kappa S} \text{div}U = 0,$$

$$\eta(T) = c\eta_{el}(T) + (1-c)vT^{\frac{\gamma}{\gamma-1}},$$

$$\partial_t(T + \kappa_1 c) = D_0 \partial_x^2 T,$$

$$U = cw_s + (1-c)w_l,$$

где U , S — средняя скорость и энтропия расплава, D_0 — коэффициент, характеризующий теплопроводность, положим с целью нормировки $D_0 = 1$; κ_1 — коэффициент, характеризующий теплоту внутреннего плавления, этот коэффициент также можно варьировать по порядку величины, положим для определённости $\kappa_1 = 800$. Коэффициент $\eta_{el}(T)$ равен (см. [12]):

$$\eta_{el}(T) = \beta_l \varepsilon (1-\varepsilon)^2 \frac{\alpha_l}{\rho_s \beta_T} \left(1 + \frac{\beta_T}{\alpha_l} \frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \right) e^{-\frac{1}{2} \frac{\kappa_1}{\rho_s} \beta_l \varepsilon^2},$$

$$\varepsilon = \frac{\alpha_l(T - T_0)}{(1 + \alpha_l(T - T_0))},$$

T_0 — начальная температура расплава.

ЗАМЫКАНИЕ МОДИФИЦИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ БИО

Приводимое ниже построение модели начальной стадии кристаллизации бинарных сплавов опирается на выбранную выше классическую модель механики сплошной среды (модифицированную систему Био) с замыкающим уравнением (4).

Параметр накачки. Для конструирования фазового перехода мы прежде всего должны построить аналог потенциала Ландау–Гинзбурга (удельную свободную энергию Гиббса). Ниже мы исследуем возможность распространения теории неравновесных фазовых переходов в форме теории спиноподобного распада Кана–Хиларда на процесс кристаллизации. Выше мы выделили в фазовом про-

странстве многообразие M_{eq} (локального равновесия) и соответствующее ему замыкание системы Эйлера, описывающее ламинарное состояние расплава. Вопрос в том, можно ли на энергетическом уровне, термодинамическим анализом, определить момент и механизм зарождения кристаллизации (момент срыва с многообразия локального равновесия, момент деградации ламинарного расплава)? Как мы отмечали выше, кристаллизация наступает при увеличении охлаждения расплава. Отобранная тепловая энергия является энергией деградации расплава. Введём два параметра, характеризующих кристаллизацию. Мерой деградации расплава можно считать изменение энтальпии адиабаты на единицу отобранной тепловой энергии

$$\frac{H_{\text{sol}}}{(T_0 - T)S} = \frac{T(S - S_0) + V_l(P - P_0) + \beta T G_s}{(T_0 - T)S} = \xi^2 + v_{\text{sol}}.$$

Введём два параметра, характеризующих зарождение затвердевания расплава: параметр накачки

$$\xi^2 = \frac{T(S - S_0)}{(T_0 - T)S} \quad (6)$$

в лазерной терминологии и параметр кристаллизации (аналог числа Рейнольдса [4])

$$v_{\text{sol}} = \frac{V_l(P - P_0) + \beta T G_s}{(T_0 - T)S}.$$

Из (6) следует, что должно быть

$$\frac{T(S - S_0)}{(T_0 - T)S} = \frac{1 - \frac{S_0}{S}}{\frac{T_0}{T} - 1} > 0,$$

что справедливо, если $\frac{S_0}{S} < 1$, $\frac{T_0}{T} > 1$.

Феноменологическое определение энтальпии и энтропии. Распределение $h(\xi, v_{\text{sol}}) = \xi^2 + v_{\text{sol}}$ представляет собой меру избыточности энтальпии неоднородной термодинамической системы по отношению к однородной. За меру деградации расплава можно взять $h(\xi, v_R)$. Тогда как для совершенной смеси энтропия (см. [4])

$$s(\xi, v_{\text{sol}}) = -(h(\xi, v_{\text{sol}}) \ln(h(\xi, v_{\text{sol}})) - (1 - h(\xi, v_{\text{sol}})) \ln(1 - h(\xi, v_{\text{sol}}))). \quad (7)$$

$h(\xi, v_{R,B})$ и $s(\xi, v_{R,B})$ можно назвать энтальпией и энтропией процесса кристаллизации соответственно. Свободную энергию Гиббса процесса затвердевания расплава определим по схеме [4]. Как мы покажем ниже, условие зарождения кристаллизации имеет

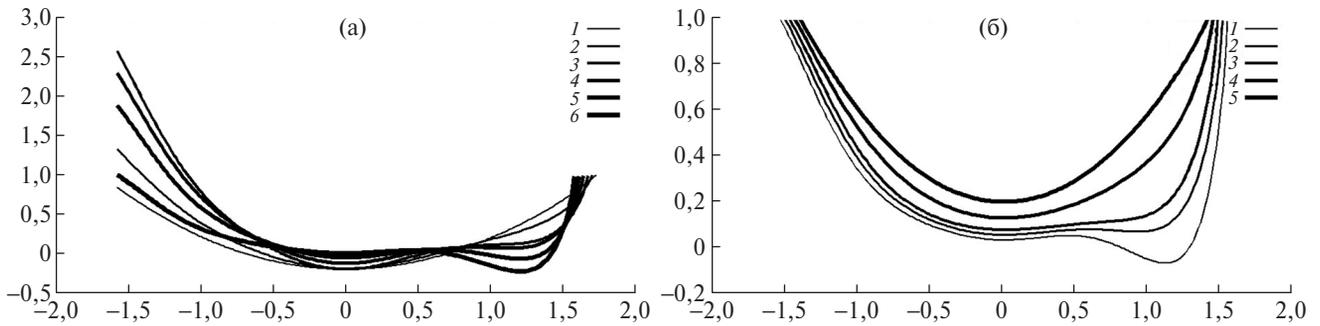


Рис. 1. а — потенциал в форме свободной энергии $\hat{g}(\xi, v_{sol})$: для $v_{sol} = -0,20$ (1); $-0,16$ (2); $-0,12$ (3); $-0,08$ (4); $-0,04$ (5); 0 (6); б — потенциал в форме свободной энергии $\hat{g}(\xi, v_{sol})$: для $v_{sol} = 0,04$ (1); $0,08$ (2); $0,12$ (3); $0,16$ (4); $0,20$ (5).

вид $v_{sol} \ll 1$. Следует заметить, что $v_{sol} \rightarrow 0$, чем больше отобранная тепловая энергия $S(T_0 - T)$, тем более развитой является кристаллизация (v_{sol} — аналог числа Рейнольдса). На рис. 1 приведены графики результирующего потенциала $\hat{g}_B(\xi, v_{sol})$.

К построению модели ламинарно-турбулентного перехода как неравновесного фазового перехода. Приведённое выше построение иллюстрирует тот факт, что термодинамический метод позволяет установить принципиальные возможности эволюции системы (в данном случае стремление к расслоению на “затвердевший” и “незатвердевший” расплав). Обезразмерив замыкание модификации системы Био, перейдём в ней к переменным (w_l, w, z, ξ, T), сделав подстановку

$$S = \frac{S_0}{1 - \left(\frac{T_0}{T} - 1\right)\xi^2},$$

$$c = \frac{Q\left(1 - \frac{1}{R}(K(S - S_0) - z)\right)}{Q\left(1 - \frac{1}{R}(K(S - S_0) - z)\right) + q}.$$

Последнее для регуляризации в правую часть уравнения для энтропии вместо вязкости введём оператор диффузионного расслоения (модификацию оператора Кана—Хилларда [4, 6]). Окончательно получаем одномерную модель описания начальной стадии кристаллизации бинарных сплавов из системы (5) и

$$\frac{d}{dt} \xi = \frac{T\left(1 - \left(\frac{T_0}{T} - 1\right)\xi^2\right)^2}{2S_0(cp_s + (1 - c)p_l)(T_0 - T)\xi} \times$$

$$\times \left\{ \eta(T)e^{-\kappa S} \operatorname{div} U - (cp_s + (1 - c)p_l) \times \right.$$

$$\times \left. \frac{S_0}{\left(1 - \left(\frac{T_0}{T} - 1\right)\xi^2\right)^2} \frac{T_0}{T^2} \xi^2 \frac{d}{dt} T \right\} + \partial_x \left(\frac{D}{T} \partial_x \mu \right),$$

$$\eta(T) = c\eta_{el}(T) + (1 - c)vT^{\frac{\gamma}{\gamma-1}},$$

$$\partial_t(T + \kappa_1 c) = D_0 \partial_x^2 T,$$

$$U = cw_s + (1 - c)w_l,$$

где химический потенциал $\mu = TS \partial_\xi \tilde{g}(\xi, v_{sol}) - \varepsilon^2 \partial_x^2 \xi$.

Численный эксперимент (одномерная модель). В численном эксперименте, случай одной пространственной переменной, на интервале $x \in (0, 1)$ для $\varepsilon = 0,005$ мы рассмотрим возмущение однородного потока управлением краевым условием, порождающим самовозбуждение затвердевания расплава: $T|_{x=0} = T_0 - Vt, V = \text{const} > 0$. На рис. 2 приведён численный эксперимент смешанной задачи для построенной одномерной системы с граничными условиями

$$\partial_x \xi|_{x=0} = \partial_x \xi|_{x=1} = 0, \quad \partial_x \mu|_{x=0} = \partial_x \mu|_{x=1} = 0,$$

$$\partial_x T|_{x=1} = 0, \quad w|_{x=0} = w_s|_{x=0} = w|_{x=1} = w_s|_{x=1} = 0,$$

при однородных начальных данных

$$T|_{t=0} = T_0^0, \quad z|_{t=0} = 0, \quad w|_{t=0} = w_s|_{t=0} = 0,$$

где T_0^0 — константа. Далее

$$\xi|_{t=0} = \xi(S|_{t=0}), \quad S|_{t=0} = S_0^0(x) = S(c_0(x)),$$

где $c_0(x)$ — начальное распределение концентрации, определяемое заправкой, и

$$\xi|_{t=0} = \sqrt{S_0(x)} = \sqrt{S(c_0(x))}.$$

Источники финансирования. Работа первого автора выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18–01–00524). Работа третьего автора

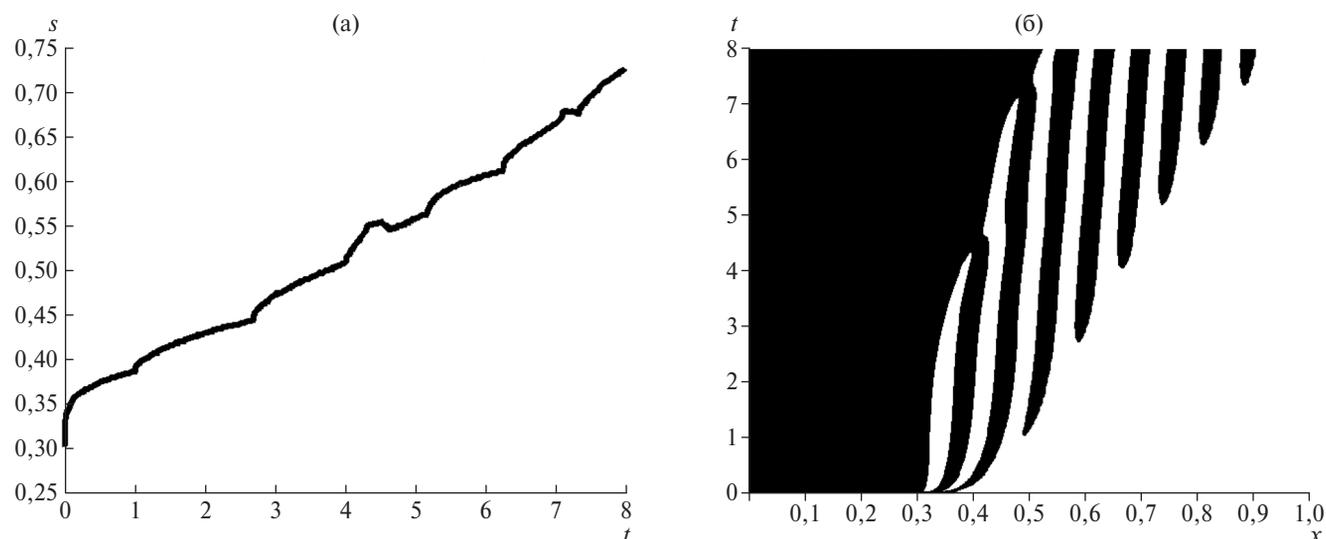


Рис. 2. а — значения энтропии S во временном сечении; б — эволюция по времени фронтов кристаллизации для $M = 800$, область закрашивается в чёрный цвет при $c < c_{cr}$ (преимущественно твёрдая фаза) и остаётся белой при $c > c_{cr}$ (преимущественно жидкая фаза).

выполнена при финансовой поддержке РТУ МИРЭА в рамках инициативной научно-исследовательской работы ИЦМР-6 “Валидация и верификация”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lukashev E.A., Radkevich E.V.* Solidification and Structuration of Instability Zones // *Applied Mathematics*. 2010. V. 1. P. 159–178.
2. *Рыков Ю.Г., Зайцев Н.А.* Численный анализ новой модели процессов кристаллизации металлов. Одномерный случай // *Математическое моделирование*. 2010. Т. 22. № 12. С. 82–102.
3. *Каблов Е.Н.* Литые лопатки газотурбинных двигателей. Сплавы. Технологии. Покрытие. М.: МИСИС, 2001. 632 с.
4. *Радкевич Е.В., Лукашев Е.А., Яковлев Н.Н., Васильева О.А., Сидоров М.И.* Введение в обобщённую теорию неравновесных фазовых переходов и термодинамический анализ задач механики сплошной среды. М.: Изд-во МГУ, 2019. 349 с.
5. *Biot M.A.* Mechanics of Deformation and Acoustic Propagation in Porous Media // *J. Appl. Phys.* 1962. V. 33. № 4. P. 1482–1498.
6. *Cahn J.W., Hilliard J.E.* Free Energy of a Non-Uniform System III. Nucleation in a Two-Component Incompressible Fluid // *J. Chemical Physics*. 1959. V. 31. P. 688–699.
7. *Hoffman D.W., Cahn J.W.* A Sector Thermodynamics for Anisotropic Surfaces I: Fundamentals and Applications to Plane Surface Junctions // *Surface Sciences*. 1972. V. 31. P. 368–388.
8. *Скрипов В.П., Скрипов А.В.* Спинодальный распад (Фазовый переход с участием неустойчивых состояний) // *УФН*. 1979. Т. 128. В. 2. С. 193–231.
9. *Вайнгард У.* Введение в физику кристаллизации металлов. М.: Мир, 1967. 159 с.
10. *Radkevich E.V., Lukashov E.A., Vasil'eva O.A.* On Hydrodynamic Instabilities Qua Nonequilibrium (Cahn–Hilliard) Phase Transitions // *Eurasian J. of Mathematical and Computer Applications*. ISSN 2306–6172. 2019. V. 7. Is. 2. P. 20–61.
11. *Radkevich E.V., Lukashev E.A., Yakovlev N.N., Vasil'eva O.A.* Study of the Rayleigh–Benard Instability by Methods of the Theory of Nonequilibrium Phase Transitions in the Cahn–Hilliard Form // *Eurasian J. of Mathematical and Computer Applications*. ISSN 2306–6172. 2017. V. 5. Is. 2. P. 36–65.
12. *Lukashev E.A., Radkevich E.V., Sidorov M.I., Vasil'eva O.A.* Investigation of the Process of Destruction of Structural Materials by the Method of Mathematical Reconstruction in the Form of a Nonequilibrium Phase Transition // *AIP Conference Proceedings* 2048, 020001 (2018); DOI: 10.1063/1.5082019. View online: <https://doi.org/10.1063/1.5082019> View Table of Contents: <http://aip.scitation.org/toc/apc/2048/1> Published by the American Institute of Physics.

CRYSTALLIZATION OF BINARY ALLOYS AND NON-EQUILIBRIUM PHASE TRANSITIONS

E. V. Radkevich¹, O. A. Vasil'eva², M. I. Sidorov³

¹*Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

²*Moscow State University of Civil Engineering (National Research University),
Moscow, Russian Federation*

³*MIREA — Russian Technological University, Moscow, Russian Federation*

Presented by Academician of the RAS V.V. Kozlov July 16, 2019

Received August 5, 2019

A model was constructed for the reconstruction of the initial stage of crystallization of binary alloys as a nonequilibrium phase transition, the mechanism of which is diffusion stratification. Numerical experiments were performed. Self-excitation of a homogeneous state by the edge control melt cooling condition.

Keywords: crystallization of binary alloys, nonequilibrium phase transition, diffusion separation, reconstruction of the initial stage of the process, self-excitation of a homogeneous state.