

На правах рукописи

ГУБАНОВ ПАВЕЛ ЮРЬЕВИЧ

**КИНЕТИКА КОАЛЕСЦЕНЦИИ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ:
РОЛЬ РАЗЛИЧНЫХ МЕХАНИЗМОВ РОСТА ЗЕРНА**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород – 2007 г.

Работа выполнена на кафедре теоретической физики физического факультета ГОУ ВПО “Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского”

Научный руководитель кандидат физико-математических наук,
доцент Максимов Игорь Лаврентьевич,
кандидат физико-математических наук,
доцент Морозов Владимир Павлович

Официальные оппоненты доктор физико-математических наук,
профессор Тетельбаум Давид Исаакович

доктор физико-математических наук,
профессор Громов Евгений Михайлович

Ведущая организация Удмурдский Государственный Университет

Защита состоится 31 октября 2007 г. в «14» часов на заседании диссертационного совета Д212.166.01 при государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования “Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского” по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп. 3 (НИФТИ).

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

Автореферат разослан «24» сентября 2007 г. Отзывы направлять по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп. 3, физический факультет ННГУ

Ученый секретарь
диссертационного совета

А.И. Машин

Актуальность работы. К моменту появления работ с основными результатами этой диссертации в изучении фазового перехода первого рода на стадии коалесценции сложилась следующая ситуация. Согласно общепризнанной теории коалесценции Лифшица – Слезова, при больших временах существует универсальное распределение зерен по размерам, которое не зависит от начального распределения зерен по размеру. Весьма важным предположением модели Лифшица - Слезова было введение в описание зерен произвольных размеров (включая и бесконечный размер). Однако существенное влияние на процесс коалесценции оказывает вид граничного условия вблизи зерна максимального размера.

В процессе коалесценции важную роль играет механизм роста зерна, который определяет вид конечного распределения зерен по размерам. Основными механизмами роста зерен являются: реакции атомов на поверхности зерна (инкорпорирование атомов внутрь зерна), объемная диффузия атомов к зерну, диффузия атомов к зерну по границам блоков или вдоль дислокационных линий. В большинстве работ кинетика коалесценция исследовалась только при действии одного из перечисленных механизмов. Однако, в реальных системах могут действовать одновременно несколько механизмов роста, тем самым изменяя конечное распределение зерен по размеру.

Основываясь на современном состоянии изучения процесса коалесценции можно сделать следующие выводы. Во-первых, классическая теория коалесценции Лифшица-Слезова не может в полной мере описать поведение системы в ходе кинетики коалесценции, так как страдает рядом недостатков: нет зависимости конечного распределения зерен по размерам от их начального распределения, применяемая теория описания коалесценции Лифшица-Слезова допускает существование зерен бесконечного размера. Во-вторых, в последующих работах либо строились модифицированные методы теории, основанные на теории Лифшица-Слезова, либо применялись

численные методы решения моделирования процесса коалесценции не дающие аналитического решения.

В связи с вышесказанным, весьма актуальной задачей является построение более точной теории кинетики коалесценции при фазовом переходе первого рода, которая отражает наличие зерна максимального размера, и позволяет учесть одновременное действие различных механизмов роста зерен. Построению нового класса решений кинетики коалесценции и посвящена эта диссертация.

Цели и основные задачи работы – исследование процесса коалесценции зерен при фазовых переходах первого рода в твердом растворе, построение автомодельного класса решений, описывающих коалесценцию, с учетом конечности максимального размера зерна.

Основные задачи работы:

1. Количественное описание закономерностей изменения среднего, максимального и критического размера зерна во времени, в зависимости от действующего механизма доставки атомов вещества к растущему зерну.

2. Теоретическое описание асимптотического распределения зерен в пространстве размеров. Исследование эволюции изменения во времени распределения зерен в пространстве размеров.

3. Исследование роли различных механизмов роста зерна (реакции на поверхности зерна, объемной диффузии мономеров к зерну и межблочной диффузии мономеров) на различных стадиях процесса коалесценции.

4. Изучение влияния плоской границы раздела между раствором и другой фазой на кинетику коалесценции в твердых растворах с пространственным – неоднородным распределением зерен по размерам.

Научная новизна. В работе впервые дано описание кинетики коалесценции с учетом конечности максимального размера зерна. Определены кинетики коалесценции при различных механизмах роста зерен новой фазы. Показано явно, что для начальных распределений зерен по размерам со степенным законом спадания вблизи максимального размера

зерна, при больших временах устанавливается распределение зерен по размерам, зависящее от начального распределения. При одновременном действии различных механизмов роста зерен описаны промежуточные режимы коалесценции. При смене контролирующего механизма роста зерен обнаружен эффект кроссовера степенных показателей в законе роста зерен с течением времени. Показано, что при наличии границы раздела между твердым раствором и другой твердой фазой (подложка, стенка), происходит растворение зерен в приграничной области, размер которой увеличивается с течением времени по степенному закону.

Практическое значение. Найденный автомодельный класс решения кинетики коалесценции, в предположении конечности максимального размера зерна, применим для механизмов роста зерен, таких как реакция на поверхности зерна, объемная диффузия мономеров и диффузии мономеров к зерну по границам блоков или дислокационным линиям. Полученный класс автомодельных решений позволяет количественно описывать кинетику коалесценции при промежуточных режимах, когда одновременно действуют несколько механизмов роста.

Построенная теория кинетики коалесценции может быть применена для прогнозирования конечного распределения зерен новой фазы по размерам, если известно начальное распределение (и наоборот). Помимо этого, на основе анализа асимптотических режимов коалесценции можно идентифицировать доминирующие механизмы массопереноса, действующие в системе в различные временные интервалы. Эти результаты можно использовать при анализе экспериментальных результатов, имеющие прикладное значение: осаждение тонких пленок, эпитаксия, затвердевание расплавов и др.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Новый автомодельный класс решений кинетики коалесценции, при учете конечности максимального размера зерна показывает, что асимптотическая функция распределения зерен по размерам при больших временах

существенно зависит от характера начального распределения и описывается степенным законом спада вблизи максимального размера зерна.

2. В процессе действия двух основных механизмов роста зерен, реакции на поверхности зерен и объемной диффузии мономеров, реализуется переходный режим коалесценции, сопровождающийся эффектом кроссовера изменения степенного показателя в законе роста во времени максимального, среднего и критического размеров зерен.

3. При альтернативных механизмах роста зерен – диффузии мономеров к зерну по границам блоков или диффузия мономеров к зерну вдоль дислокационных линий, рост зерен проходит медленнее, чем при основных механизмах роста, и при больших временах распределение зерен по размерам имеет более крутое степенное спадание вблизи максимального размера зерен, зависящее от начального распределения.

4. При наличии границы раздела между твердым раствором и другой твердой фазой (подложка, стенка), происходит растворение зерен в приграничной области, размер которой увеличивается с течением времени по степенному закону, и при больших временах устанавливается локальное асимптотическое распределение зерен по размерам в каждой точке пространства свое.

Личный вклад автора. В работе представлены результаты исследований в постановке целей и задач, которых автор диссертации принимал активное участие. Личный вклад автора заключается в проведении основных расчетов, их обсуждении и формулировании основных выводов.

Апробация результатов работы

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

- 1) 9 Нижегородская Сессия Молодых Ученых. 25 - 30 апреля 2004 г., Нижний Новгород, Россия.
- 2) VI Международный Конгресс по Математическому Моделированию. 20 – 26 сентября, 2004 г., Нижний Новгород, Россия.

3) V Международная Конференция «Нелинейные Процессы и Проблемы Самоорганизации в Современном Материаловедении». 1- 5 октября 2004 г., Воронеж, Россия.

4) XI Национальная конференция по росту кристаллов. 2004 г. Москва, Россия.

5) 10 Нижегородская Сессия Молодых Ученых. 25 - 30 апреля 2005 г., Нижний Новгород, Россия.

6) 6-ая Международная Конференция по «Рост Кристаллов и Тепломассоперенос» 26-30 сентября, 2005 г., Обнинск, Россия.

7) 11 Нижегородская Сессия Молодых Ученых. 16 - 21 апреля 2006 г., Нижний Новгород, Россия.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения и восьми глав с заключением по каждой главе. Общий объем диссертации составляет 100 страницы, включая рисунки и список цитируемой литературы, который содержит наименования и публикации по теме диссертации.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе диссертации приводится обзор современного состояния в изучение кинетики коалесценции. Сделан вывод о том, что существующая теория кинетики коалесценции требует дальнейшего обобщения в плане зависимости кинетических процессов от вида начальной функции распределения зерен по размерам.

Во второй главе диссертации рассматривается кинетика постнуклеационной стадии [7], [8], в результате которой обеспечивается возникновение стадии коалесценции (оствальдского созревания) при фазовом переходе первого рода. Постнуклеационная стадия характерна тем, что пересыщение системы уменьшается со временем, при этом критический размер зародышей резко (практически экспоненциально) увеличивается и достигает размера, сравнимого со средним размером зародышей, который, в свою очередь, растет сравнительно медленно.

Для оценки времени перехода от зародышеобразования к процессу коалесценции определена длительность постнуклеационной стадии $\frac{1}{\tau}$, величина которой определяется начальными параметрами системы. В частности, показано, что пересыщение системы в течение этой стадии экспоненциально спадает со временем:

$$\Delta(t) = \frac{\Delta_0 c}{1 + (c - 1)e^{\tau(t-t_0)}}, \quad (1)$$

где Δ_0 - начальное пересыщение. При этом установлено, что критического размер зерен растет со временем экспоненциально:

$$b(t) = \frac{1}{\Delta(t)} = \frac{1 + (c - 1)e^{\tau(t-t_0)}}{\Delta_0 c}. \quad (2)$$

Средний размер зерен растет медленнее, чем критический (см. рис. 1):

$$\bar{a}(t) = \frac{1}{\tau} \left(\frac{1}{c - 1 + e^{-\tau(t-t_0)}} \right)^c. \quad (3)$$

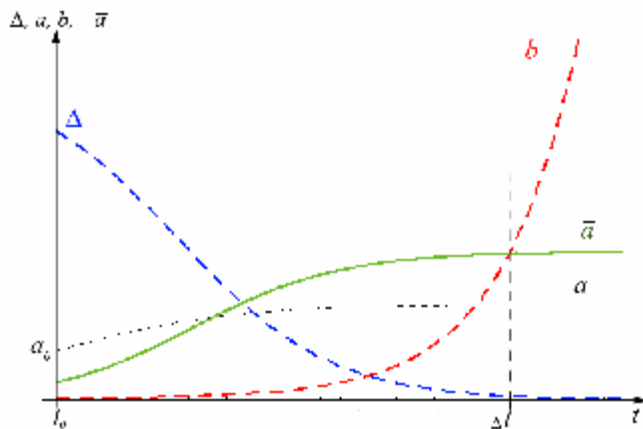


Рис. 1. Постнуклеационная стадии роста зерен. Изменение критического размера $b(t)$, среднего размера зародыша и пересыщения $\Delta(t)$ во времени.

В третьей главе рассмотрен транспорт мономеров к растущему зерну. При этом учтены следующие механизмы роста зерна: механизм реакции на поверхности зерна и механизм объемной диффузии мономеров. Выведено обобщенное уравнение скорости роста зерна, имеющее следующий вид (приведено в безразмерных переменных):

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{Dbb_0}{D + bb_0a(t)} \left(\frac{1}{b(t)} - \frac{1}{a(t)} \right), \quad (4)$$

где $a(t)$ – размер зерна, $b(t)$ – критический размер зерна, b - эффективная константа реакции на поверхности зерна (отвечающая за присоединение и отсоединение мономеров к зерну), D - объемный коэффициент диффузии. Здесь и далее начало отсчета времени $t=0$ совпадает с моментом начала процесса коалесценции.

Введен новый подход в описании кинетики коалесценции в однородном пересыщенном твердом растворе в рамках предположения о конечном значении максимального размера зерна. Начальная функция распределения $f(a_0,0) = j(a_0)$, учитывающую конечность максимального размера зерна $a(L,t) \equiv a_L(t)$, выбирается в виде:

$$j(a_0) = \begin{cases} \Phi(a_0), & 0 < a_0 < l \\ \frac{\Phi(l)}{(L-l)^m} (L-a_0)^m, & l < a_0 < L \end{cases} \quad (5)$$

Отметим, что используемая в (5) величина $\Phi(a_0)$ – произвольная функция, показатель m – произвольное число ($m > -1$), а $l < L$ - промежуточный размер, определяющий область локализации степенного «хвоста» начальной ФР. Введение начальной ФР типа (5) обусловлено тем обстоятельством, что к моменту завершения стадии зародышеобразования ФР зерен по размерам характеризуется наличием максимального размера $a_L(0)$ (см. [15]).

В четвертой главе построен новый класс решения задачи кинетики коалесценции в асимптотическом пределе при больших временах. Данный класс решений основан на подходе конечности максимального размера зерна. Получено соотношение, из которого следует, что максимальный размер зерна является конечной величиной. Показано, что поведение предельной функции распределения определяется только характером степенного поведения начальной функции распределения вблизи зерна максимального размера.

При условии, когда контролирующим механизмом роста зерна является механизм реакции на поверхности зерна ($D \gg bb_0a$), асимптотическая функция распределения зерен по размерам имеет вид:

$$P_W^{(m)}(V) = \frac{3V(1-V)^m I^{(m+1)I}}{(I-V)^{m+5}}, \quad (6)$$

где $V = \frac{a}{a_L}$ – отношение фактического размера к максимальному размеру зерна, $I = (m+4)/(m+1)$ (ФР приведена в безразмерных переменных). Найдены зависимости от времени для максимального $a_L(t)$, среднего $\bar{a}(t)$ и критического $b(t)$ размера зерна, характеризуемые степенным законом роста размера зерна с показателем степени $1/2$:

$$a_L = \left(\frac{2}{I}t\right)^{1/2}, \quad b = \frac{m+4}{2m+5} \left(\frac{2}{I}t\right)^{1/2}, \quad \bar{a} = a_L \frac{2(4+m)(5+2m)}{9(6+5m+m^2)}. \quad (7)$$

При условии, что контролирующим механизмом является объемная диффузия $D \ll bb_0a$, асимптотическая функция распределения зерен по размеру имеет вид:

$$P_{LS}^{(m)}(V) = \frac{3|V_2|^{A_2(m+1)} V_1^{A_1(m+1)} (1-V)^m V^2}{(V_1-V)^{A_1(m+1)+1} (V-V_2)^{A_2(m+1)+1}}, \quad (8)$$

где $I = (2m+5)/(m+1)$. Временная зависимость максимального $a_L(t)$ и критического $b(t)$ размера зерна при этом механизме роста имеет следующий степенной закон роста с показателем степени $1/3$:

$$a_L = \left(\frac{3}{I}t\right)^{1/3}, \quad b = \left(\frac{3}{g}t\right)^{1/3}, \quad \frac{1}{g} = b^2 \frac{db}{dt} = \frac{(2m+5)^2(m+1)}{27(m+2)^3}. \quad (9)$$

Вид полученной ФР определяется значением показателя степени $m > -1$, который является главным параметром для эволюции во времени функции распределения зерен по размеру. Отметим, что в пределе $m \rightarrow \infty$ полученные выражения для ФР переходят в соответствующие решения [2, 3] соответственно, отвечающим классическим решениям Вагнера и Лифшица – Слезова. На рис. 2 приведены ФР, соответствующие нашей теории в сравнении с двумя классическими теориями.

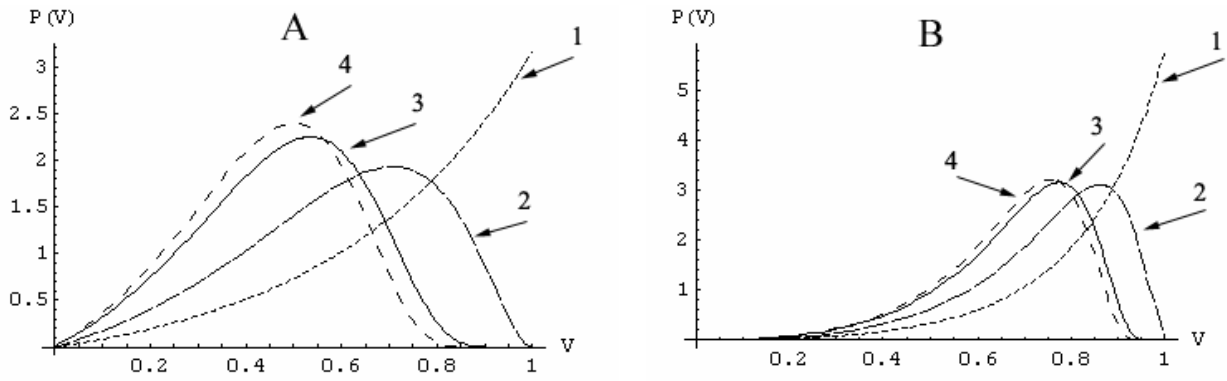


Рис. 2. Функция распределения зерен по размерам. Сравнение двух теорий.
 А) Механизм реакции на поверхности зерна. В) Механизм диффузии мономеров.
 Кривые 1 - 3 - распределения (6) (А) и (8) (В) при $m=0$; 2; 20, соответственно.
 4 – распределение Вагнера (А) и Лифшица-Слезова (В))

В пятой главе рассмотрены промежуточные режимы коалесценции, в которых одновременно действуют механизм рост зерен реакции на поверхности зерна и механизм объемной диффузии мономеров. Выяснено, что при достаточно большом значении параметра

$$c = \frac{D}{bb_0} \gg 1 \quad (10)$$

реализуется переход между двумя различными режимами коалесценции; т.е. режимом, когда контролирующим механизмом роста зерна является реакция на поверхности зерна и режимом, контролируемым объемной диффузией. Наглядно такой переход можно представить в виде следующей схемы:

$$f(V, t = 0) \xrightarrow{t_1} P_W^{(m)}(V) \xrightarrow{t_2} P_{LS}^{(m)}(V) \quad (11)$$

где времена t_1 , t_2 соответствуют временам перехода между стадиями роста см. [A1, A2, A4]. На рис. 3. продемонстрирована эволюция функции распределения зерен по размерам при переходном режиме коалесценции по схеме (11).

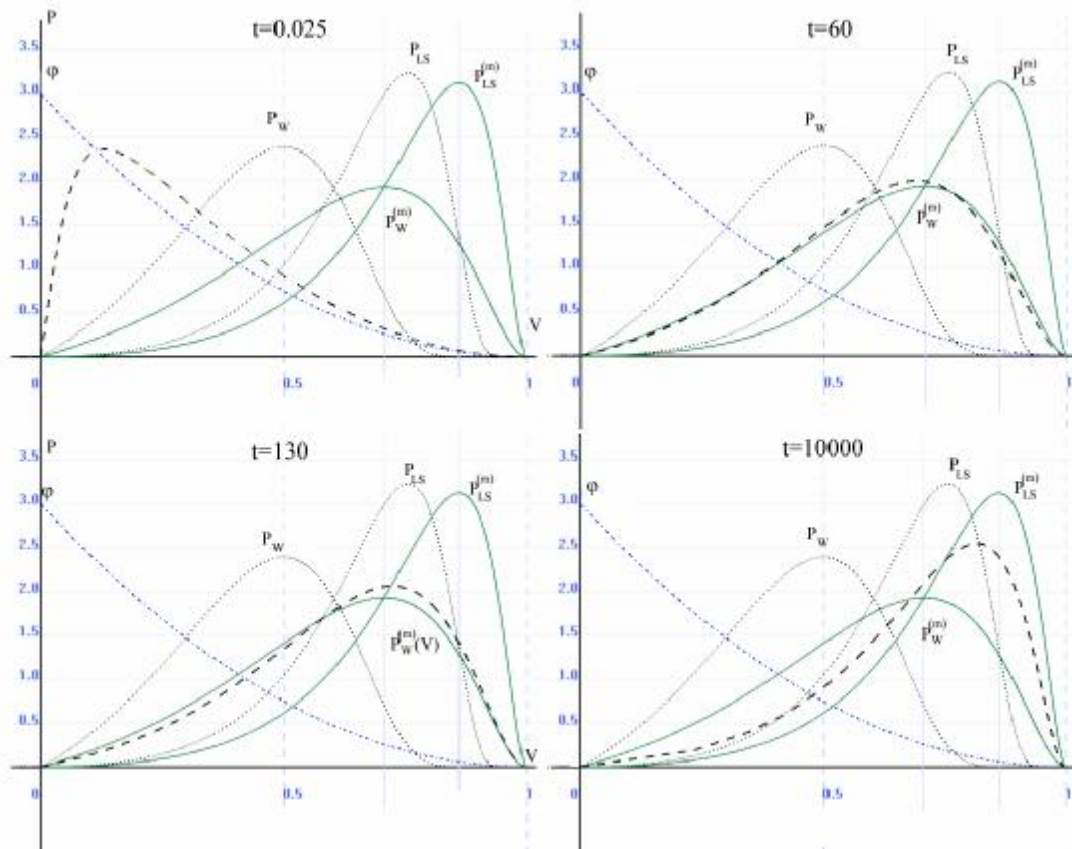


Рис. 3. Эволюция функции распределения при переходном режиме коалесценции. $m=2$, $\chi=25$, $L=3$, φ - начальное распределение (5), штриховая линия - распределение зерен по размерам в указанный на рис. моменты времени t ; асимптотические распределения: P_W – Вагнера, P_{LS} – Лифшица-Слезова, $P_W^{(m)}$ - (6), $P_{LS}^{(m)}$ - (8))

Вследствие изменения механизма роста зерна (от реакций на поверхности зерна на диффузию мономеров), имеет место эффекта кроссовера степенного показателя k , изменяющийся от $k=1/2$, до $k=1/3$, который описывает временную зависимость максимального и критического размера зерна $a_L(t) \sim t^k$, $b(t) \sim t^k$ (рис. 5). В противоположном случае $c \ll 1$, когда кинетика коалесценции контролируется, в основном, только процессами объемной диффузии мономеров, переходный режим коалесценции не возникает и указанный кроссовер невозможен.

Проведен сравнительный анализ экспериментальных результатов [17, 18] систем Fe-Si-Ti и Ni-Si с полученным классом решений, на примере которых демонстрируются эффект кроссовера двух механизмов коалесценции см. рис.4.

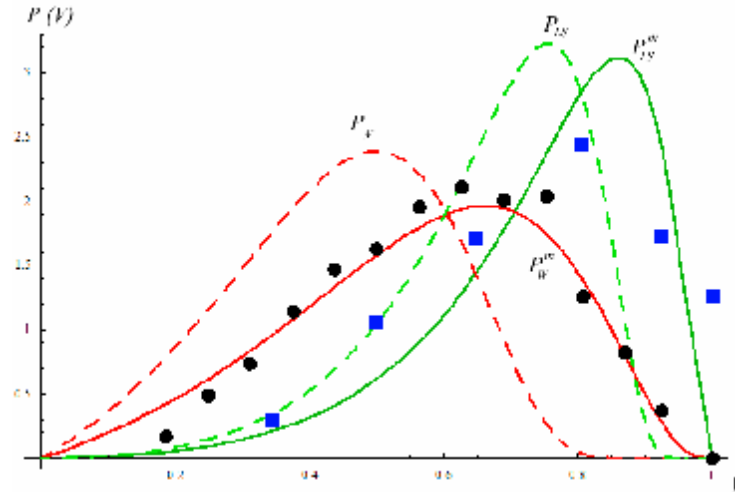


Рис. 4. Функция распределения зерен по размерам.

Сравнение теории и эксперимента.

Штриховые линии соответствуют распределению Вагнера P_W и ЛС P_{LS} .

$P_W^{(m)}(V)$ и $P_{LS}^{(m)}(V)$ - распределения (6) при $m = 3$ и (8) при $m = 2$.

Кружочки – экспериментальные данные [17] (*Fe-Si-Ti*).

Квадратики – экспериментальные данные [18] (*Ni-Si*).

В шестой главе рассмотрен процесс коалесценции в условиях дополнительного действия альтернативного механизма роста зерна. При альтернативном механизме доставка мономеров к зерну из раствора осуществляется за счет диффузии мономеров по границам блоков или по дислокационным линиям [А3]. В результате действия такого альтернативного механизма роста, показано, что закон изменения размера зерна имеет вид:

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{D_{ef}}{a(t)^2} \left(\frac{1}{b(t)} - \frac{1}{a(t)} \right), \quad (12)$$

где D_{ef} - эффективный коэффициент диффузии, зависящий от коэффициента диффузии по границам блоков, соотношения размеров блоков и зерна и пространственного расположения блоков относительно растущего зерна. В результате применения автомодельного анализа получена новая асимптотическая функция распределения зерен по размерам в виде:

$$P_s^{(m)}(V) = 3V^3 \text{Exp} \left(\frac{3C_2}{I-3} \left(\text{ArcTan} \left(\frac{a}{b} \right) - \text{ArcTan} \left(\frac{a+V}{b} \right) \right) \right) \times \frac{V_1^{3B_2/(I-3)} (a^2 + b^2)^{3D_2/(I-3)} (V-1)^{(6-I)/(I-3)}}{(b^2 + (a+V)^2)^{(1+3D_2/(I-3))} (V-V_1)^{(1+3B_2/(I-3))}} \quad (13)$$

где параметры распределения определены в тексте диссертации. С использованием решения (12) описана зависимость от времени максимального и критического радиусов зерен:

$$a_L = \left(\frac{4}{I} t \right)^{1/4}, \quad b = \frac{I}{I+1} \left(\frac{4}{I} t \right)^{1/4}, \quad (14)$$

где параметр λ равен $I = 3(2+m)/(m+1)$. Асимптотическая функция распределения зерен по размеру имеет степенной закон спада вблизи максимального размера зерна. При этом максимальный размер кластера



растет со временем по новому степенному закону (14).

Отметим, что в пределе $m \rightarrow \infty$ выражение (12) переходит в распределение Слезова, сформулированное в [16].

В работе исследован процесс доставки мономеров к растущему зерну в условиях действия различных механизмов роста зерна: при условии транспортировки мономеров за счет объемной диффузии, межблочной диффузии и поверхностных реакций. Нами получено аппроксимационное выражение для скорости роста зерна в виде:

$$\dot{a}_{tot} = \left(\tilde{b}^{-1} + (D_v/a + D_{ef}/a^2)^{-1} \right)^{-1} \left(\frac{1}{b} - \frac{1}{a} \right), \quad (15)$$

где \tilde{b} – коэффициент скорости реакции на поверхности зерна, D_v – объемный коэффициент диффузии мономеров к зерну, D_{ef} – эффективный коэффициент диффузии мономеров к зерну при альтернативном механизме роста. Построена иерархия переходных режимов коалесценции, возникающих в процессе смены доминирующего механизма роста зерен, описаны условия, при которых может наблюдаться тот или иной режим коалесценции. Показано, что в зависимости от соотношения параметров модели кинетика

коалесценции может претерпевать переходы (один или несколько) между возможными режимами (см. рис. 5.)

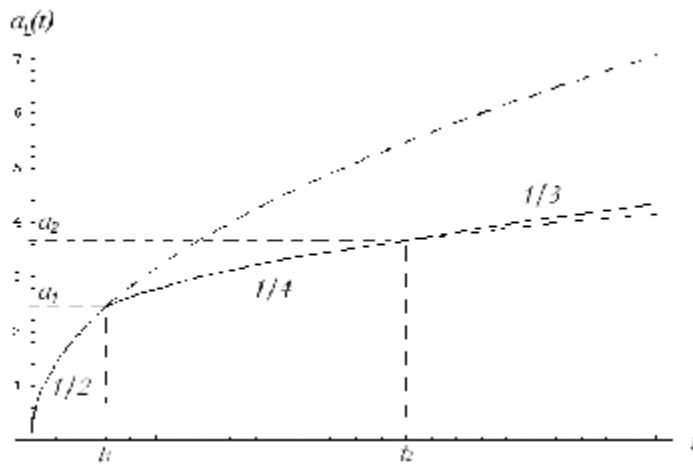


Рис. 5. Эффект кроссовера смены закона роста зерна максимального размера

Отметим также, что новый закон роста зерна (12) (с показателем $k=1/4$) может реализоваться в промежуточном временном интервале $t_1 < t < t_2$ и, как правило, предшествует режиму коалесценции, контролируемой только объемной диффузией.

В седьмой главе исследована кинетика коалесценции в пространственно неоднородной среде, в которой присутствует плоская граница раздела между раствором и новой фазой. При наличии границы раздела фаз возникает макроскопический диффузионный поток мономеров к границе [A5]:

$$D_m \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0} = b(n - n_{00}). \quad (16)$$

Граничное условие (16) означает, что на границе раздела фаз ($x=0$) отрицательный градиент концентрации приводит к обеднению раствора, т.е. происходит растворение зерен в приграничной области, таким образом, в приграничной зоне возникает уменьшение концентрации мономеров ниже их равновесной концентрации.

На основе численных расчетов найдена скорость движения массы зародившихся зерен новой фазы от границы раздела, имеющая степенной характер зависимости от времени $V_b \sim t^{-a}$, где величина показателя степени зависит от величины диффузионного потока мономеров в приграничную

область. Полученные расчеты показывают, что в течение короткого интервала времени происходит быстрое растворение зерен в приграничной области, в следствии чего происходит сдвиг концентрации зерен в пространстве

$N(x, t) = \int_0^{R_L} F(\alpha, r, t) dr$ (где $F(\alpha, r, t)$ - ФР зерен размера r) см.

рис. 6.

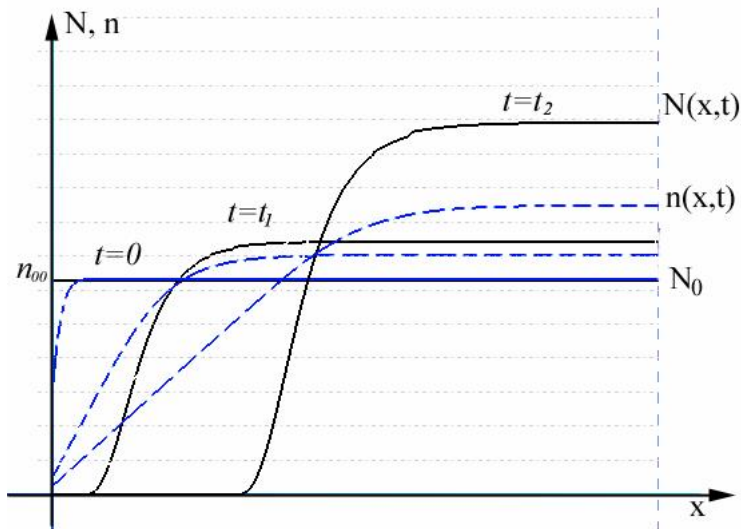


Рис. 6. Эволюция во времени концентрации зерен $N(x)$ – сплошная линия и концентрации мономеров $n(x)$ – штриховая линия, в моменты времени $t = 160, 650$ соответственно, n_{00} и N_0 – концентрации в начальный момент времени.

Продемонстрирована эволюция функции распределения зерен по размерам в пространстве, показано, что при больших временах устанавливается локальное асимптотическое распределение зерен по размерам, т.е. в каждой точке пространства возникает свое распределение по размерам (см. [A5]).

Восьмая глава представляет собой дополнение к результатам диссертации. В этой главе, носящей вспомогательный характер, рассмотрен вывод равновесной концентрации у поверхности зерна, дан расчет интегрального потока мономеров на поверхность зерна.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Теоретически исследован процесс роста зерен новой фазы при фазовом переходе первого рода на стадии коалесценции. Найден новый

автомодельный класс решений кинетики коалесценции, полученный в рамках предположения о существовании конечного значения максимального размера зерна и степенного характера поведения начальной функции распределения вблизи максимального размера. Показано, что асимптотическое поведение функции распределения зерен по размерам существенно зависит от характера начального распределения. Полученный класс решений описывает кинетику коалесценции в условиях действия следующих механизмов роста зерна: реакции на поверхности зерна, механизм объемной диффузии мономеров и диффузии мономеров по границам блоков или дислокационным линиям.

2. Исследованы промежуточные асимптотические режимы коалесценции, имеющие место при одновременном действии нескольких механизмов роста зерна. Установлено, что при смене контролирующего механизма роста устанавливаются разные режимы кинетики коалесценции. Такие переходы возникают при смене механизмов роста: от реакции на поверхности зерна к объемной диффузии мономеров или от реакции на поверхности зерна к межблочной диффузии мономеров, которая в итоге сменяется объемной диффузией мономеров. При смене контролирующего механизма роста наблюдается эффект кроссовера: изменение степенного показателя k в законе изменения максимального, среднего и критического размера зерна с течением времени $\sim t^k$. При переходе от реакции на поверхности к объемной диффузии k изменяется от $\frac{1}{2}$ до $\frac{1}{3}$. При переходе от реакции на поверхности к межблочной диффузии и затем к объемной диффузии k проходит последовательность $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}$.
3. Рассмотрена кинетика коалесценции при альтернативном механизме росте зерна, когда доставка мономеров к зерну осуществляется за счет межблочной диффузии мономеров или диффузии по дислокационным линиям. Подробно рассмотрены трехмерная и двумерная модели доставки

мономеров к зерну посредством диффузии вдоль межблочных границ или вдоль дислокационных линий. Сформулировано обобщенное уравнение для скорости роста зерен, контролируемого альтернативным механизмом роста. На основе нового класса решений получена асимптотическая функция распределения зерен по размерам; зависимости максимального, среднего и критического размера зерна от времени: $\sim t^{1/4}$. Обсуждены условия, при которых могут быть реализованы (и, возможно, наблюдаются) альтернативные режимы коалесценции.

4. Показано, что при наличии границы раздела между твердым раствором и другой твердой фазой (подложка, стенка), происходит растворение зерен в приграничной области, размер которой увеличивается с течением времени по степенному закону. Показано, что при больших временах устанавливается локальное асимптотическое распределение зерен по размерам в каждой точке пространства свое.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. W. Ostwald. Zs. Phys. Chem. Bd. 34, s. 495, 1900.
2. C. Wagner. Z. Electrochem, 65, 581, 1961.
3. И.М. Лифшиц, В.В. Слезов, «О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов», ЖЭТФ, т. 35, с. 479, 1958.
4. В.В. Слезов, В.В. Сагалович, «Диффузионный распад твердых растворов», УФН. т. 151, с. 67, 1987.
5. V.V. Slezov. "Theory of Diffusive Decomposition of Solid Solution" Physics Reviews, v. 17, p. 1, 1995.
6. С.А. Кукушкин, В.В. Слезов. «Дисперсные системы на поверхности твердых тел: механизмы образования тонких пленок» С. Петербург. Наука, 1996.

7. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, “Дисперсные системы на поверхности твердых тел: механизмы образования тонких пленок”, ЖЭТФ, т. 113, с. 2193, 1998
8. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, «Процессы конденсации тонких пленок», УФН, т. 168, с. 1083, 1998.
9. B. Meerson, P. Sasorov. «Domain stability, competition, growth, and selection in globally constrained bistable systems», Phys. Rev. E, v. **53**, p. 3491, 1996.
10. B. Meerson. “Fluctuations provide strong selection in Ostwald ripening”, Phys. Rev. E, v.60, p. 3072, 1999.
11. M. Conti, B. Meerson, A. Peling, P. V. Sasorov. “Phase ordering with a global conservation law: Ostwald ripening and coalescence”, Phys.(ical) Rev.(iew) E, v. 62, p. 046117, 2002.
12. B. Giron, B. Meerson, P Sasorov, “Weak selection and stability of localized distributions in Ostwald ripening”, Phys. Rev.E, v. **58**, 4213, 1998.
13. M. Marder, «Correlation and Droplet Growth», Phys. Rev. Lett. v. **55**, p. 2953, 1985.
14. G. Madras, B.J. McCoy. «Temperature effects for crystal growth: a distribution kinetics approach», Acta Materialia, v. 51, p. 2031, 2003.
15. J. D. Robson. «Modelling the evolution of particle size distribution during nucleation, growth and coarsening», Materials Science and Technology, v. 20, p. 441, 2004.
16. В. В. Слезов. «Коалесценция пересыщенного твердого раствора в случае диффузии по границам блоков или дислокационным линиям», ФТТ, т. 9, с. 1187, 1967
17. К.Н. Heinig, T. Muller, B. Schmidt, M. Strobel, W. Moller, “Interfaces under ion irradiation: growth and taming of nanostructures”, Appl. Phys. A, v 77, p. 17–25, 2003.
18. E. N. Bower, J. A. Whiteman. The Mechanism of Phase Transformation in Crystalline Solids, The Institute of Metals, London, p.119. 1969.

19. В. П. Морозов, И. Л. Максимов, «Кинетика роста зерен на поздней стадии коалесценции», Неорганические материалы, т. 35, с. 1021, 1999.

СПИСОК РАБОТ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- A1.** П.Ю. Губанов, Ю. В. Желтов, В. П. Морозов, И. Л. Максимов, “Кинетический кроссовер режимов коалесценции в пересыщенном твердом растворе”, Журнал Технической физики, т. 75, с. 81, 2005.
- A2.** П.Ю. Губанов, В. П. Морозов, И. Л. Максимов, “Промежуточно-асимптотический режим коалесценции в пересыщенном однородном растворе, изменение кинетических индексов”, Кристаллография, т. 51, с. 536, 2006.
- A3.** П.Ю. Губанов, И. Л. Максимов, “Кинетика коалесценции в условиях действия альтернативных механизмов роста зерна”, Кристаллография, т. 52, с. 969–978, 2007.
- A4.** P. Yu. Gubanov, I. L. Maksimov and V. P. Morozov, “Kinetics of Ostwald ripening: crossover from Wagner's mode to the Lifshitz - Slezov mode”, Journal Modern Physics Letters B, v. 21, p. 941-953, 2007.
- A5.** П.Ю. Губанов, В. П. Морозов, И. Л. Максимов, “Кинетика коалесценции в пространственно неоднородной среде” Сборник трудов 6-й международной конференции “Рост монокристаллов и тепломассоперенос”, Обнинск, ГНЦ РФ-ФЭИ, с. 591- 594, 2005.