

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 539.12

А.И. ПОТЕКАЕВ^{1,2}, А.А. ЧАПЛЫГИНА³, П.А. ЧАПЛЫГИН³, М.Д. СТАРОСТЕНКОВ³,
В.В. КУЛАГИНА^{2,4}, А.А. КЛОПОТОВ^{2,5}, Л.С. ГРИНКЕВИЧ¹

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ВАКАНСИЙ НА СЛАБОУСТОЙЧИВЫЕ
ПРЕДПЕРЕХОДНЫЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ
ХАРАКТЕРИСТИКИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА NiAl**

С помощью метода Монте-Карло на примере интерметаллида NiAl рассмотрено влияние концентрации вакансий на структурно-фазовые состояния и энергетические характеристики в процессе нагрева и охлаждения. Проведенный анализ показал, что наличие и концентрация вакансий оказываются существенными факторами в области предпереходных слабоустойчивых структурно-фазовых состояний перед превращением. С одной стороны, наличие вакансий и их концентрация не влияют на температурные диапазоны структурно-фазовых превращений, с другой – оказывают существенное влияние на сами предпереходные слабоустойчивые структурно-фазовые состояния и скорость протекания диффузионных процессов. Из температурного поведения параметра ближнего порядка следует, что чем выше концентрация вакансий (т.е. выше дефектность системы), тем при более высоких температурах появляются тенденции повышения атомного порядка за счет интенсификации диффузионных процессов. Это свидетельствует, в свою очередь, о повышении температуры начала структурных превращений с повышением его дефектности в ходе охлаждения. Анализ температурных зависимостей параметра дальнего порядка интерметаллида позволяет заключить, что повышение концентрации вакансий (т.е. повышение дефектности сплава), приводит к естественному результату – понижению дальнего порядка в системе в области слабоустойчивых предпереходных состояний и повышению температуры начала превращения.

Ключевые слова: интерметаллид, слабоустойчивые предпереходные состояния, атомный порядок, структурные дефекты.

Введение

Металлические материалы с ОЦК-структурой в настоящее время широко используются из-за своих уникальных физико-механических свойств. Среди них можно выделить две группы, представители которых имеют отличные структурно-фазовые особенности и закономерности поведения, особенно в высокотемпературной области слабоустойчивых предпереходных состояний: традиционные сплавы (например, сплавы системы Cu–Zn) и интерметаллиды (например, сплавы системы Ni–Al).

Алюминид никеля активно исследуется как потенциальный структурный материал для авиационной и космической промышленности. Полезными характеристиками NiAl являются высокая температура плавления, относительно низкая плотность, хорошая химическая стойкость, высокая теплопроводность, высокая прочность, металлоподобные свойства. NiAl может относительно легко обрабатываться. Основные недостатки беспримесного NiAl – низкая ударная вязкость и сопротивление повреждениям при комнатной температуре, а также низкая прочность и ползучесть при повышении температуры. Низкая плотность может давать снижение массы до 40 % по сравнению с никелевыми сплавами, а высокая теплопроводность обеспечивает эффективное охлаждение и значительное уменьшение температуры рабочей поверхности материала (например, лопатки турбины газотурбинного двигателя).

Характерным признаком сплавов системы Ni–Al является высокая энергия упорядочения. Интерметаллид NiAl и твердые растворы замещения на его основе обладают высокой степенью дальнего порядка, сохраняющейся во всей температурно-концентрационной области их существования вплоть до температуры плавления.

Наличие смешанной ковалентной, ионной и металлической межатомной связи в NiAl предопределяет большой объем элементарной ячейки и большой вектор Бюргерса, уменьшение независимых эквивалентных систем скольжения, сложность реакций взаимодействия дислокаций друг с другом, с границами разного рода и дефектами упаковки, обуславливает локализацию скольжения, затрудняет передачу деформации через границу. Большая величина сил межатомного взаимодействия в решетке моноалюминида никеля и обуславливает, главным образом, свойства β -сплавов [1].

На β -сплавах системы Ni–Al выполнены классические исследования слабоустойчивых предпереходных состояний [1]. Важным направлением представляется исследование конкуренции и взаимного влияния параллельно протекающих процессов (упорядочение и распад β -твердого раствора; упорядочение и микрорасслоение; упорядочение и мартенситное превращение) и регулирования процессами сложного атомного упорядочения с целью повышения структурной стабильности и механических свойств жаростойких интерметаллидов на основе β -фазы системы Ni–Al. Известно, что моноалюминид никеля характеризуется высокой температурой плавления (1638 °C) и большой теплотой образования. Кристаллы NiAl обладают сильной упругой анизотропией и связанной с ней анизотропией свойств по сравнению со структурами с неупорядоченной ОЦК-решеткой [1].

Естественно, что свойства сплавов связаны со структурно-фазовым состоянием материалов, свойствами и структурой фаз, которые имеют, как правило, структурные дефекты. Исследование свойств и структурно-фазового состояния материалов методами компьютерного моделирования позволяет детально изучить механизмы происходящих физико-химических процессов в предпереходной слабоустойчивой области [2–4]. Знание структурных особенностей материала позволяет, естественно, определять набор его физических характеристик, оказывать влияние на конструирование новых материалов с заданным набором свойств.

Исследование свойств и структурно-фазового состояния материалов экспериментальными методами не только трудоемко, но часто и механизмы происходящих физико-химических процессов вскрыть бывает очень непросто. Поэтому систематические исследования структурно-фазовых состояний металлических систем методами компьютерного моделирования привлекают пристальное внимание, так как удастся вскрывать происходящие в системе физико-химические процессы и явления [1–3]. Например, ранее были рассмотрены особенности слабоустойчивых структурно-фазовых состояний в ГЦК-системах Cu–Pt, в ОЦК-системе на примере системы Ni–Al [4–17].

Цель данной работы – исследовать с помощью метода Монте-Карло влияние концентрации вакансий на особенности предпереходных слабоустойчивых структурно-фазовых состояний и энергетические характеристики интерметаллических ОЦК-соединений (на примере интерметаллида NiAl) в области структурно-фазовых превращений в процессе нагрева и охлаждения.

Применяемые приближения и используемая модель

Исследуем структурно-фазовые особенности слабоустойчивых предпереходных состояний и энергетические характеристики интерметаллических ОЦК-соединений на примере интерметаллида NiAl в процессе нагрева и охлаждения в зависимости от концентрации вакансий в системе. Для этого рассмотрим структурно-фазовые состояния и энергетические характеристики бездефектного интерметаллида NiAl при $T = 0$ К. Бездефектная система будет выступать в дальнейшем в качестве исходного состояния. Параметры решетки стартовой конфигурации сплава определяются минимумом конфигурационной энергии, поиск которого осуществлен методом градиентного спуска. Далее исследуем изменение слабоустойчивых структурно-фазовых состояний и конфигурационных энергий интерметаллида NiAl в зависимости от количества вакансий (1, 2, 5) при условии сохранения стехиометрии, что соответствует изменению их концентрации от $\sim 1.5 \cdot 10^{-5}$ до $\sim 7.6 \cdot 10^{-5}$. Для активизации процесса диффузии в систему случайным образом вводится, например, одна вакансия, что соответствует концентрации $\sim 1.5 \cdot 10^{-5}$. Рассматривается только вакансионный механизм диффузии. Динамическая или кинетическая составляющая присутствуют только в перескоках атомов в вакантные узлы.

Известно, что моноалюминид никеля NiAl плавится, находясь в упорядоченном состоянии [1]. Разупорядочение тем не менее при повышении температуры происходит. Считается, что температура разупорядочения интерметаллида NiAl выше температуры его плавления. По этой причине рассмотрим гипотетические переходы порядок – беспорядок в ходе нагрева и беспорядок – порядок в ходе охлаждения, чтобы исследовать закономерности сложного атомного упорядочения – разупорядочения для целей повышения структурной стабильности и механических свойств жаростойких сплавов на основе β -фазы системы Ni–Al и выявления влияния процессов разупорядочения при повышении температуры на свойства интерметаллида.

Рассмотрим упорядоченную ОЦК-структуру со сверхструктурой $B2$ (рис. 1). Пусть модель (расчетный блок) включает $32 \times 32 \times 32$ элементарных ячеек (65536 атомов), при этом используем периодические граничные условия, что эффективно соответствует бесконечной системе с длинным периодом.

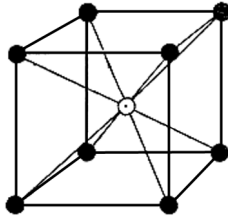


Рис. 1. Элементарная ячейка сверхструктуры B2

Взаимодействие между атомами сплава зададим, используя полуэмпирический парный потенциал Морзе в виде

$$\varphi(r_{ij}) = D_{KL} \beta_{KL} e^{-\alpha_{KL} r_{ij}} \left(\beta_{KL} e^{-\alpha_{KL} r_{ij}} - 2 \right),$$

где $\alpha_{KL}, \beta_{KL}, D_{KL}$ – параметры потенциалов, описывающих связи атомов сортов $K-L$; r_{ij} – расстояние между атомами. Конфигурационную энергию системы будем рассчитывать как $E = 1/2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \varphi(r_i - r_j)$, где $r_i - r_j$ – радиус-векторы атомов i и j ; N – количество атомов в системе; M – количество ближайших соседей, в которое включены атомы трех координационных сфер взаимодействия.

Для расчетов используем алгоритм Метрополиса метода Монте-Карло. Будем полагать, что состояние системы может изменяться только в дискретные моменты времени с шагом Δt . В данной работе не осуществляется переход к реальному времени, поэтому продолжительность каждого эксперимента определяется в условных единицах времени, равных числу перескоков атомов на место вакантных узлов, т.е. $\Delta t = 1$ соответствует одной итерации. На каждой итерации рассчитывается вероятность перескока ближайшего к вакантному узлу атома i , находящегося от него на

расстоянии до трех координационных сфер, на место этой вакансии: $p_i = A^{-1} e^{-\frac{E_{\max} - (E_{\text{н}}^i - E_{\text{к}}^i)}{kT}}$, где $E_{\text{н}}^i$ – энергия i -го атома в начальном положении; $E_{\text{к}}^i$ – энергия i -го атома после перескока на место вакансии; A – константа нормировки; E_{\max} – максимальная разность начальной и конечной энергий атомов: $E_{\max} = \max_{0 \leq i \leq M} (E_{\text{н}}^i - E_{\text{к}}^i)$. Для определения константы нормировки A строилось разбиение отрезка $[0;1]$: $0 = A_0 < A_1 < A_2 < A_3 < \dots < A_{M-1} < A_M = 1$ так, чтобы $|A_i - A_{i-1}| = p_i$. Затем при помощи генератора случайных чисел выбиралось число $B \in [0;1]$ и определялся отрезок разбиения, которому это число принадлежало, т.е. находился атом с индексом j из условия: $A_{j-1} \leq B < A_j$. Для каждой температуры выполнялось $5 \cdot 10^6$ итераций, шаг изменения температуры составлял 100 К.

При исследовании особое внимание уделим изменениям конфигурационной энергии, параметров ближнего и дальнего порядка, структурно-фазовым слабоустойчивым состояниям в процессах нагрева (гипотетического разупорядочения) и охлаждения (гипотетического упорядочения).

Параметр ближнего порядка на i -й сфере будем определять в приближении Каули [18]: $\sigma_i^{AB} = 1 - \frac{P_i^{AB}}{C_B}$, где C_B – концентрация атомов компоненты B ; P_i^{AB} – вероятность образования для атома сорта A связи $A-B$ на i -й координационной сфере.

Параметр дальнего порядка (усредненный по системе) будем рассчитывать в приближении Горского – Брэгга – Вильямса [19]: $\eta = \frac{P_A^{(1)} - C_A}{1 - \nu}$, где $P_A^{(1)}$ – вероятность заполнения атомами компоненты A узлов первого типа; C_A – концентрация атомов компоненты A в сплаве; ν – концентрация узлов первого типа.

Результаты и их обсуждение

При описании межатомного взаимодействия используем параметры потенциалов Морзе, приведенные в таблице.

Параметры потенциала Морзе для интерметаллида NiAl

Тип взаимодействия	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	β	$D, \text{эВ}$
Ni–Ni	1.360166	37.72	0.451
Ni–Al	1.073363	17.551	0.6016
Al–Al	1.024939	27.743	0.3724

Рассмотрим гипотетические переходы порядок – беспорядок в процессе нагрева и беспорядок – порядок в процессе охлаждения, чтобы исследовать структурно-фазовые особенности слабоустойчивых предпереходных состояний и энергетические характеристики интерметаллида NiAl в процессе нагрева и охлаждения в зависимости от концентрации вакансий в системе.

Зависимости средней конфигурационной энергии от температуры в процессе гипотетических фазовых переходов порядок – беспорядок и беспорядок – порядок приведены на рис. 2 для системы с 1, 2 и 5 вакансиями. Видно, что при нагреве до температуры ~ 900 К энергия практически не изменяется. В этом интервале температур влияние концентрации вакансий на значение средней конфигурационной энергии системы не наблюдается. В диапазоне от ~ 1000 до ~ 1400 К идет постепенное увеличение значений энергии. Во всех рассматриваемых случаях при повышении температуры системы рост энергии начинается примерно с 1100 – 1200 К. Некоторое отличие возникает в интервале 1600 – 1800 К. Причем чем больше вакансий, тем круче кривая зависимости средней энергии и тем шире температурный диапазон отличия. Это можно понимать так, что при какой-то определенной температуре в этом интервале температур структурно-фазовые состояния систем с отличающимися концентрациями вакансий различаются. Увеличение числа вакансий увеличивает скорость превращения. Чем больше вакансий в сплаве, тем интенсивнее происходит в нем процессы понижения атомного порядка. Данный результат согласуется с полученными в [1] закономерностями, что интенсивное возрастание диффузии происходит за счет увеличения концентрации

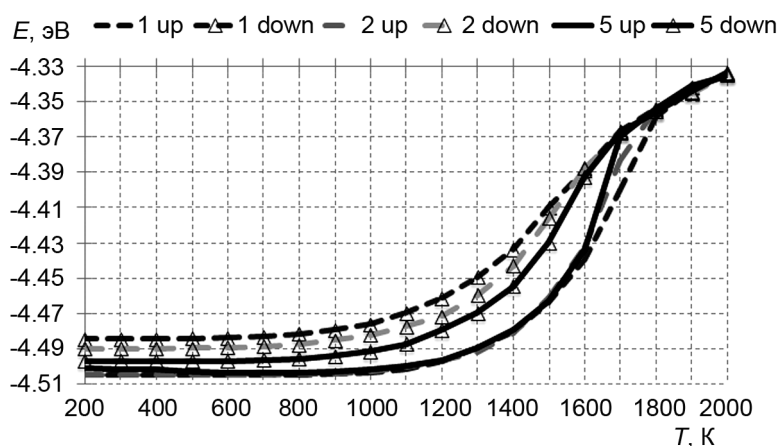


Рис. 2. Средняя конфигурационная энергия в процессе нагрева и охлаждения с 1, 2 и 5 вакансиями

структурных вакансий. Так как было показано [17], что в интерметаллидах понижение атомного порядка является следствием структурных преобразований, то повышение концентрации вакансий, как можно ожидать, приводит к интенсификации структурно-фазовых превращений в интерметаллидах. Резкое повышение происходит в диапазоне от 1400 до 1900 К. Судя по всему, это соответствует гипотетическому фазовому переходу порядок – беспорядок. К температуре ~ 1900 К рост энергии прекращается.

При охлаждении ситуация кардинально другая. При охлаждении до ~ 1800 К происходит постепенное уменьшение значений энергии. Снижение температуры ниже ~ 1600 К приводит к появлению отличий в температурных зависимостях средней энергии систем с различным количеством

вакансий. Можно полагать, что это говорит о различных структурно-фазовых состояниях систем с различным количеством вакансий. Резкое понижение значения конфигурационной энергии происходит в температурном диапазоне от ~ 1800 до ~ 1300 К. При температурах ниже ~ 1600 К наблюдается ярко выраженная зависимость средней конфигурационной энергии от концентрации вакансий, причем чем больше концентрация, тем ближе кривая зависимости к кривой нагревания. Такое поведение можно понимать и так. Чем больше вакансий в системе при какой-то температуре, тем интенсивнее идут диффузионные процессы, тем быстрее идут процессы повышения атомного порядка, тем ниже значения средней энергии системы.

Разность значений средней энергии после завершения цикла превращений в ходе нагрева-охлаждения (в результате гипотетических фазовых переходов порядок – беспорядок и беспорядок – порядок) обусловлена формированием двух антифазных доменов в результате фазовых переходов в системе. Антифазные домены отличаются для различных концентраций вакансий. Это свидетельствует о большей скорости процессов атомного разупорядочения или упорядочения в сплаве с большим количеством вакансий. Судя по всему, это происходит за счет интенсификации диффузионных процессов при повышении дефектности системы за счет повышения концентрации вакансий. Как следствие, это свидетельствует о большей интенсификации структурно-фазовых превращений в системе с большей дефектностью интерметаллида – большей концентрацией вакансий.

Отметим, что при нагреве и охлаждении сплав проходит различные структурно-фазовые состояния, что следует из различия расположения кривых нагрева и охлаждения системы с какой-то определенной концентрацией вакансий. В свою очередь, это говорит о необратимости диффузионных процессов при нагреве – охлаждении. Более того, в окрестности температуры $T \approx 1700$ К энергии различных структурно-фазовых состояний системы отличаются очень мало, что позволяет предполагать реализацию целого спектра отличающихся структурно-фазовых состояний. Это может означать реализацию некоторого набора предпереходных слабоустойчивых состояний в некотором интервале температур в окрестности температуры структурно-фазовых превращений, что можно понимать как реализацию слабоустойчивого состояния системы.

Поведение параметра ближнего порядка на первой координационной сфере интерметаллида NiAl (рис. 3) свидетельствует о тенденции сплава к упорядочению (отрицательное значение параметра ближнего порядка говорит о стремлении к упорядочению). Естественно, что при повышении температуры ближний порядок понижается.

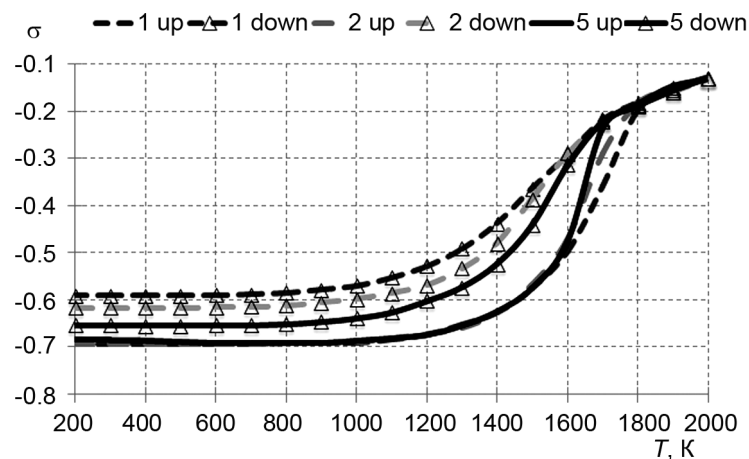


Рис. 3. Параметр ближнего порядка в процессе последовательного нагрева и охлаждения

При нагреве в интервале температур ~ 1600 – 1800 К значения параметра ближнего порядка различаются для систем с различным содержанием вакансий, что еще раз свидетельствует о возможном наборе в этом интервале температур различающихся структурно-фазовых состояний, т.е. о реализации слабоустойчивого состояния интерметаллида NiAl в предпереходной области температур.

При охлаждении структурно-фазовые состояния систем с различными концентрациями вакансий различаются даже при одной и той же температуре. Чем выше дефектность системы (выше концентрация вакансий), тем при более высоких температурах происходит упорядочение системы за счет интенсификации диффузионных процессов. Это говорит о том, что чем выше дефектность структуры, тем при более высоких температурах происходят структурно-фазовые преобразования в интерметаллиде. Из поведения кривых температурных зависимостей параметра ближнего порядка несложно видеть необратимость процессов атомного разупорядочения и упорядочения в процессах нагрева – охлаждения интерметаллида. Это, в свою очередь, предполагает необратимость структурно-фазовых преобразований при термоциклировании.

Изменения параметра ближнего порядка для всех рассматриваемых конфигурационных вариантов сплава (рис. 3) согласуются с изменениями конфигурационной энергии (рис. 2).

Особый интерес представляет анализ температурных зависимостей параметра дальнего порядка интерметаллида – моноалюминида NiAl (рис. 4) при нагреве и охлаждении, особенно в области слабоустойчивых предпереходных состояний системы.

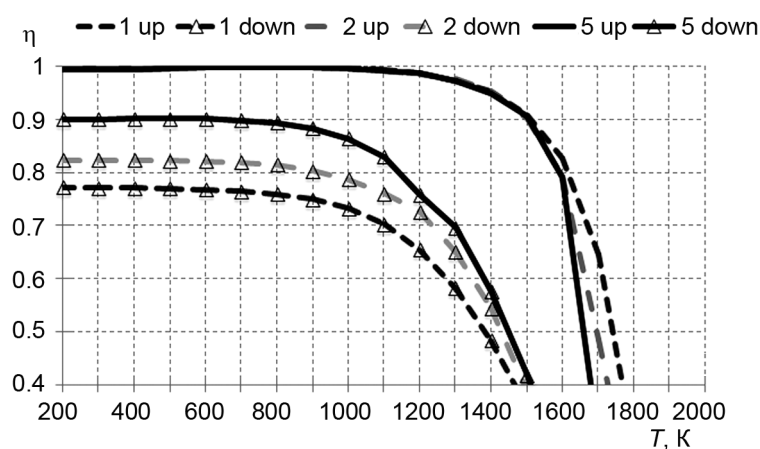


Рис. 4. Зависимость параметра дальнего порядка в процессе последовательного нагрева и охлаждения

Несложно видеть, что при нагреве до $T \approx 1100$ К не наблюдается нарушений дальнего порядка (η) во всех рассматриваемых случаях, а в интервале температур ~ 1100 – 1600 К его значение плавно понижается. Резкое снижение наблюдается в интервале $T \approx 1600$ – 1800 К при стремлении значения η к нулю, что подразумевает существенное снижение атомного дальнего порядка в системе. Повышение дефектности, т.е. рост концентрации вакансий в сплаве, приводит к естественному результату – понижению дальнего порядка в системе в области слабоустойчивых предпереходных состояний и понижению температуры превращения.

Отметим, что при низких температурах концентрация вакансий не оказывает существенного влияния на степень дальнего порядка в системе, следовательно, не оказывает существенного влияния и на структурно-фазовое состояние сплава. Влияние концентраций вакансий проявляется только в области предпереходных слабоустойчивых состояний, причем при росте количества вакансий в системе существенно понижается как дальний порядок, так и температура превращения.

Очень интересная ситуация реализуется при охлаждении интерметаллида. Дальний порядок отсутствует до $T \approx 1600$ К. При его появлении η существенно зависит от концентрации вакансий, т.е. дефектности сплава. Чем больше дефектность, тем интенсивнее идут диффузионные процессы, тем быстрее нарастает дальний порядок в системе. Чем больше вакансий в системе, тем выше степень дальнего порядка при той же температуре. Резкое повышение значения параметра дальнего порядка наблюдается при понижении температуры от ~ 1600 до ~ 1200 К. При дальнейшем понижении температуры крутизна кривой уменьшается до $T \approx 800$ К, а при более низких температурах значение параметра дальнего порядка практически не изменяется, но для каждой концентрации оно свое.

Температурный диапазон изменения параметров ближнего (рис. 3) и дальнего (рис. 4) порядка согласуется с температурным диапазоном изменения конфигурационной энергии (рис. 2).

Заключение

Анализ влияния концентрации вакансий на состояния и энергетические характеристики интерметаллида NiAl в процессе нагрева и охлаждения показал, что наличие и концентрация вакансий оказываются существенными факторами в области предпереходных слабоустойчивых структурно-фазовых состояний перед превращением. С одной стороны, наличие вакансий и их концентрация не влияют на температурные диапазоны структурно-фазовых превращений, с другой – оказывают существенное влияние на сами предпереходные слабоустойчивые структурно-фазовые состояния и скорость протекания диффузионных процессов.

Оказывается, при нагреве увеличение числа вакансий увеличивает скорость превращения. Чем больше вакансий, тем интенсивнее происходят в сплаве процессы понижения атомного порядка. Это происходит в результате структурно-фазовых преобразований, поэтому повышение концентрации вакансий, как можно ожидать, приводит к интенсификации структурно-фазовых превращений в интерметаллидах.

При охлаждении понижение температуры приводит к появлению различий в температурных зависимостях средней энергии систем с различным количеством вакансий. Чем больше вакансий в системе при какой-то температуре, тем интенсивнее идут диффузионные процессы, тем быстрее идут процессы повышения атомного порядка, тем ниже значения средней энергии системы. Это происходит за счет интенсификации диффузионных процессов при повышении дефектности системы за счет повышения концентрации вакансий. Как следствие, это свидетельствует о большей интенсификации структурно-фазовых превращений в системе с большей концентрацией вакансий, т.е. большей дефектностью.

Отмечено, что при нагреве и охлаждении сплав проходит различные структурно-фазовые состояния, что свидетельствует о необратимости процессов при нагреве-охлаждении. Более того, в окрестности температуры превращения энергии различных структурно-фазовых состояний системы отличаются очень мало, что позволяет предполагать реализацию целого спектра отличающихся структурно-фазовых состояний. Это, в свою очередь, может свидетельствовать о реализации некоторого набора предпереходных слабоустойчивых состояний в некотором интервале температур в окрестности температуры структурно-фазовых превращений, что можно понимать как реализацию слабоустойчивого состояния системы.

Из температурного поведения параметра ближнего порядка следует, что чем выше дефектность системы, т.е. выше концентрация вакансий, тем при более высоких температурах появляются тенденции повышения атомного порядка за счет интенсификации диффузионных процессов. Это говорит, в свою очередь, о повышении температуры начала структурных превращений с повышением его дефектности в ходе охлаждения. Из поведения кривых температурных зависимостей параметра ближнего порядка несложно видеть необратимость процессов понижения атомного порядка и его возрастания в ходе нагрева – охлаждения интерметаллида, что предполагает необратимость структурно-фазовых превращений интерметаллида при термоциклировании.

Анализ температурных зависимостей параметра дальнего порядка интерметаллида позволяет заключить, что повышение дефектности, т.е. концентрации вакансий в сплаве, приводит к естественному результату – понижению дальнего порядка в системе в области слабоустойчивых предпереходных состояний и повышению температуры начала превращения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Косицын С.В., Косицына И.И. // Успехи физики металлов. – 2008. – Т. 9. – С. 195–258.
2. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Кулагина В.В. Влияние точечных и планарных дефектов на структурно-фазовые превращения в предпереходной слабоустойчивой области металлических систем / под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2014. – 488 с.
3. Конева Н.А., Тришкина Л.И., Потекаев А.И., Козлов Э.В. Структурно-фазовые превращения в слабоустойчивых состояниях металлических систем при термосиловом взаимодействии / под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2015. – 344 с.
4. Чаплыгин П.А., Потекаев А.И., Чаплыгина А.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2015. – Т. 58. – № 4. – С. 52–57.
5. Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А., Старостенков М.Д. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2016. – Т. 13. – № 3. – С. 403–407.
6. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2016. – Т. 59. – № 5. – С. 3–8.
7. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 7. – С. 78–87.

8. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Козлов Э.В., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 9. – С. 59–69.
9. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Кулагина В.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 2. – С. 16–26.
10. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Тришкина Л.И. и др. // Изв. РАН. Сер. физич. – 2016. – Т. 80. – № 11. – С. 1576–1578.
11. Чаплыгина А.А., Потекаев А.И., Чаплыгин П.А. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2016. – Т. 13. – № 2. – С. 155–161.
12. Чаплыгина А.А., Потекаев А.И., Чаплыгин П.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2016. – Т. 59. – № 10. – С. 13–22.
13. Полетаев Г.М., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2015. – Т. 58. – № 1. – С. 38–43.
14. Потекаев А.И., Морозов М.М., Клопотов А.А. и др. // Изв. вузов. Черная металлургия. – 2015. – Т. 58. – № 8. – С. 589–596.
15. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 9. – С. 118–126.
16. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 10. – С. 115–124.
17. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2018. – Т. 61. – № 3. – С. 12–27.
18. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. – М.: Наука, 1977. – 253 с.
19. Кривоглаз М.А., Смирнов А.А. Теории упорядочивающихся сплавов. – М.: Физматгиз, 1958. – 388 с.

Поступила в редакцию 12.11.18.

¹ Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия

² Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова
Томского государственного университета, г. Томск, Россия

³ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул, Россия

⁴ Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия

⁵ Томский государственный архитектурно-строительный университет,
г. Томск, Россия

Чаплыгина Александра Александровна, к.ф.-м.н., докторант, e-mail: genphys@mail.ru;

Потекаев Александр Иванович, д.ф.-м.н., профессор, профессор НИ ТГУ, директор СФТИ ТГУ, e-mail: kanc@spti.tsu.ru;

Чаплыгин Павел Александрович, аспирант, e-mail: genphys@mail.ru;

Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой, e-mail: genphys@mail.ru;

Кулагина Валентина Васильевна, к.ф.-м.н., доцент, ст. науч. сотр. СФТИ ТГУ, доцент СГМУ, e-mail: kanc@spti.tsu.ru;

Клопотов Анатолий Анатольевич, д.ф.-м.н., профессор, профессор ТГАСУ, ст. науч. сотр. НИ ТГУ, e-mail: klopotovaa@tsuab.ru;

Гринкевич Лариса Сергеевна, д.э.н., профессор, профессор, e-mail: kanc@spti.tsu.ru.