

01;05

## Учет ненулевой объемной доли новой фазы в кинетике кристаллизации расплавов

© А.В. Коропов<sup>1</sup>, С.А. Кукушкин<sup>2</sup>, Д.А. Григорьев<sup>2</sup><sup>1</sup> Сумской государственной аграрный университет,  
244030 Сумы, Украина<sup>2</sup> Институт проблем машиноведения РАН,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 27 марта 1998 г.)

Исходя из приближения самосогласованного среднего поля получены выражения как для скорости роста зародышей с учетом экранировки тепловых потоков от выделенного зародыша, так и для длины экранировки тепловых потоков. Показано, что скорость роста зародыша зависит от степени кристаллизации расплава. Изучено влияние столкновения частиц, происходящего при их слиянии в поликристаллическое твердое тело на процесс кристаллизации расплава. Получена уточненная функция распределения по размерам на стадии теплового остывающего созревания.

В настоящее время проявляется большой интерес к теоретическому описанию процесса кристаллизации расплавов [1–6]. Построение полной теории, описывающей все стадии этого процесса (зарождение, независимый рост зародышей, остывающее созревание), имеет огромное значение как для физики фазовых переходов, так и для практической металлургии. В работах [2,3] была исследована стадия зарождения новой фазы в расплавах, а в [4,5] построена теория остывающего созревания ансамбля зародышей в кристаллизующемся многокомпонентном расплаве. Однако все предлагаемые теории остывающего созревания [4–6] основаны на приближении нулевой объемной доли, т.е. при выводе основных зависимостей считается, что объем, занятый частицами новой фазы, строго равен нулю. Это упрощение влияет на такие параметры теории зарождения, как длина экранировки тепловых потоков и скорость роста островка данного радиуса [7]. Необходимо также учесть, что при изучении теплового остывающего созревания сток тепла учитывается только в уравнении теплового баланса, т.е. рассматривается эволюция системы в целом, на макроуровне. В настоящей работе будет рассмотрено влияние стока тепла на микроуровне, т.е. на уровне роста отдельного зародыша.

Впервые влияние ненулевой объемной доли новой фазы при диффузионном росте зародышей и при распаде пересыщенных твердых растворов было изучено в работах [8–10]. Следует выделить также работу [11], в которой используется метод, основанный на классической диаграммной технике.

В данной работе будет рассмотрена кристаллизация расплавов с учетом конечного расстояния между зародышами и получены выражения для скорости роста и длины экранировки в самосогласованном приближении эффективной среды с учетом экранировки тепловых потоков на выделенный зародыш.

Другой задачей настоящей работы станет исследование влияния ненулевой объемной доли на поздней стадии

фазового перехода первого рода в расплавах — стадии теплового остывающего созревания [4–6].

Итак, перейдем к выводу выражений для скорости роста зародыша радиуса  $R$  с учетом экранировки тепловых потоков.

### Самосогласованное приближение эффективной среды с учетом экранировки тепловых потоков на выделенный зародыш

Пусть в переохлажденном однокомпонентном расплаве находятся зародыши новой фазы. Для определенности примем, что они имеют сферическую симметрию. Из расплава отводится тепло с постоянной по времени мощностью стока  $K < 0$ . Температура  $T(\mathbf{r}, t)$ , где  $\mathbf{r}$  — координата точки пространства,  $t$  — время, будет определяться уравнением теплопроводности в неподвижной жидкости

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{q} + K, \quad \mathbf{q} = -\chi \nabla T \quad (1)$$

с граничными условиями на поверхности  $S_i$  некоего  $i$ -го зародыша радиуса  $R$

$$(\mathbf{q}\mathbf{n})|_{S_i} = \beta(T - T_R)|_{S_i}, \quad (2)$$

где  $\rho$  — плотность расплава,  $\chi$  — коэффициент температуропроводности,  $C_p$  — теплоемкость,  $\beta$  — удельный граничный поток атомов на зародыш.

Для того чтобы решить задачу о динамике роста многих частиц, необходимо решить уравнение (1) с граничными условиями (2), сформулированными для всех зародышей. Очевидно, что такая задача точно не решается. Для ее решения мы будем использовать приближение самосогласованного среднего поля [9,10]. Суть этого подхода состоит в замене неоднородного по пространству теплового поля  $T(\mathbf{r}, t)$  усредненным по всем островкам

ансамбля однородным полем, модулированным полем выделенного зародыща. Эволюция поля температуры во времени определяется уравнением баланса тепла в системе, что делает этот подход самосогласованным. В рамках настоящей работы мы учтем, что объемная доля новой фазы не равна нулю и, следовательно, расстояние между островками является конечным. Очевидно, что тепловое поле в области, близкой к выделенному зародыщу, формируется в основном им, а влияние всего ансамбля начинает существенно сказываться только на определенном расстоянии от зародыща. Таким образом, для выделения зародыща можно определить зону влияния, в которой нет других зародышей, и аппроксимировать эту зону сферой радиуса  $R_0(R)$ . Физически это означает, что все тепло, отводимое внешним стоком  $K$ , выделяется данным зародышем. Таким образом, все пространство, занятое кристаллизующимся расплавом, мы разделяем на две зоны: область влияния  $R < r < R_0$  и внешнюю область  $r \geq R_0$ , которые мы вначале опишем отдельно, а затем свяжем полученные решения. Можно показать, что внутри зоны влияния  $R < r < R_0$  уравнение (1) справедливо в квазистационарном приближении

$$-\operatorname{div} \mathbf{q} + K = 0. \quad (3)$$

Во внешней области  $r \geq R_0$  мы должны перейти от совокупности локализованных источников тепла от каждого зародыща к сплошной среде с непрерывно распределенными стоками. Для этого мы обобщим подход, развитый в [10] для случая роста островков из адсорбированного пара на поверхности подложки. Проведем усреднение уравнения (1) во всяком "физически" бесконечно малом объеме  $\Delta V$ , содержащем большое число зародышей,

$$\langle \dots \rangle = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V'} \dots dV'. \quad (4)$$

Выполнив операцию (4), для уравнения (1) запишем его в виде

$$\rho C_P \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = -(\operatorname{div} \langle \mathbf{q} \rangle)_{\text{macro}} - \tilde{I} + K(1 - \eta), \quad (5)$$

где

$$(\operatorname{div} \langle \mathbf{q} \rangle)_{\text{macro}} = \frac{1}{\Delta V} \oint_S \mathbf{q} d\mathbf{S};$$

$S$  — поверхность, охватывающая отдельные зародыши в объеме  $\Delta V$ ;

$$\tilde{I} = \frac{1}{\Delta V} \sum_i \oint_{S_i} \mathbf{q} d\mathbf{S}$$

— удельный поток тепла, выделяемого всем ансамблем зародышей в физической точке  $\mathbf{r}$ ;  $\eta$  — объемная доля зародышей.

Ниже мы покажем, что существенное изменение температуры происходит в области влияния данного зародыща, а вне ее  $\langle T \rangle$  отличается от средней температуры

расплава  $\bar{T}$  только на длине экранировки тепловых потоков окружающими центрами, и мы можем заменить в (5)  $\partial \langle T \rangle / \partial t$  на  $d\bar{T} / dt$ .

Объединяя (3) и (5), имеем искомое усредненное уравнение теплопроводности для выделенного зародыща в самосогласованном среднем поле  $\bar{T}$  с учетом экранировки тепловых потоков

$$[-\operatorname{div} \mathbf{q} + K] \Theta(R_0 - r) + \left[ -(\operatorname{div} \langle \mathbf{q} \rangle)_{\text{macro}} - \tilde{I} + K(1 - \eta) - \rho C_P \frac{d\bar{T}}{dt} \right] \Theta(r - R_0) = 0, \quad (6)$$

где  $\Theta(x)$  — ступенчатая функция Хевисайда

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Граничные условия для (6) имеют вид

$$\chi \frac{dT}{dr} \Big|_{r=R} = \beta(T(R) - T_R); \quad \langle T \rangle \Big|_{r \rightarrow \infty} = \bar{T}(t). \quad (7)$$

Средняя температура  $\bar{T}(t)$  определяется самосогласованным образом из уравнения теплового баланса. Кроме того, для решения уравнения (6) нам необходимо в дополнение к (7) наложить условия "сшивки" температур  $T$  и  $\langle T \rangle$ , а также тепловых потоков  $\mathbf{q}$  и  $\langle \bar{q} \rangle$  на границе области влияния ( $r = R$ ).

Воспользуемся решением уравнения (6) с граничными условиями (7) следующим методом. Представим температуру расплава  $T$  и плотность потока тепла  $\mathbf{q}$

$$T = T_0 + T_1, \quad \mathbf{q} = \mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_1 = -\chi(\nabla T_0 + \nabla T_1). \quad (8)$$

При этом, естественно, для средней температуры расплава  $\bar{T} = \bar{T}_0 + \bar{T}_1$  поток  $\mathbf{q}_1$  и температура  $T_1$  определяются только наличием стока  $K$  (при  $K = 0$  соответственно  $T_1 = 0$ ,  $\mathbf{q}_1 = 0$ ) и не равны нулю только внутри области влияния. Они определяются из естественного условия на границе области влияния  $\mathbf{q}_1|_{r=R_0} = 0$ . Внутри нее полагаем  $\langle T_1 \rangle = \bar{T}_1$ .

Поток  $\mathbf{q}_0$  в (8) определяется обменом тепла между зародышами, и мы его будем называть обменным потоком. Для этого потока граница области влияния не выделена. Перейдем к новым переменным в уравнении (6) и граничных условиях (7). Имеем уравнение теплопроводности для  $T_1$  (9) с соответствующими граничными условиями (10)

$$-\operatorname{div} \mathbf{q}_1 + K = 0, \quad (9)$$

$$\chi \frac{dT_1}{dr} \Big|_{r=R} = \beta T_1(R); \quad T_1|_{r=R_0} = T^*; \quad T_1|_{r > R_0} = \bar{T}_1. \quad (10)$$

Величина  $T^*$  определяется из условия самосогласования

$$\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty R_0^3(R) f(R, t) dR = 1 \quad (11)$$

и требования

$$\chi \frac{dT_1}{dr} \Big|_{r=R_0} = 0.$$

Здесь  $f(R, t)$  — функция распределения зародышей по размерам. Считая, что в области эффективной среды  $(\text{div} \langle \mathbf{q}_1 \rangle)_{\text{macro}} = 0$ , получим уравнение (12) с граничными условиями (13) для вычисления значения  $T_0$

$$-\text{div} \mathbf{q}_0 \cdot \Theta(R_0 - r) + \left[ -(\text{div} \langle \mathbf{q}_0 \rangle)_{\text{macro}} - \tilde{I} + K(1 - \eta) - \rho C_p \frac{d\bar{T}}{dt} \right] \Theta(r - R_0) = 0, \quad (12)$$

$$\chi \frac{dT_0}{dr} \Big|_{r=R} = \beta(T_0(R) - T_R); \quad T_0 \Big|_{r \rightarrow \infty} = \bar{T}_0. \quad (13)$$

Таким образом, мы привели уравнение (6) с граничными условиями (7) к системе уравнений (9), (12) с граничными и дополнительными условиями (10), (11), (13).

Вначале необходимо найти поток  $q_1$  из уравнения (9). Его решение не представляет трудностей, поэтому сразу выпишем значение потока тепла  $q_1$  от растущего зародыша радиуса  $R$

$$-q_{1R} = \chi \frac{dT_1}{dr} \Big|_{r=R} = -\frac{KR}{3} + \frac{\chi R_0^{\frac{1}{6}}}{R} \frac{\left(\frac{K}{\chi}\right) (R_0^2 - R^2) + T^* + \frac{KR}{3\beta}}{(R_0 - R) + \frac{\chi R_0}{\beta R}}, \quad (14)$$

где

$$T^* = \frac{1}{3} \left(\frac{K}{\chi}\right) \frac{R_0^3}{R} \left(1 - \frac{R}{R_0}\right) \left(1 + \frac{1}{2} \frac{R}{R_0}\right) + \frac{K}{3\beta R^2} (R_0^3 - R^3). \quad (15)$$

Теперь, подставляя (15) в (14), имеем

$$-q_{1R} = \frac{K}{3R^2} (R_0^3 - R^3). \quad (16)$$

Определим радиус влияния выделенного зародыша  $R_0(R)$  из выражений (11) и (15). Введем обозначения  $x \equiv R_0/R$ ,  $\alpha = 3\chi T^*/KR^2$ ,  $\gamma \equiv \chi/\beta R$ ,  $\gamma_0 = \chi/R\bar{R}$ . В результате система (11), (15) будет иметь следующий вид:

$$\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty x^3 \cdot f(R, t) \cdot R^3 dR = 1, \quad (17)$$

$$(x-1)^2 \left(x + \frac{1}{2}\right) + \gamma(x^3 - 1) = \alpha. \quad (18)$$

Решение системы (17), (18) не представляет особых математических трудностей, поэтому перейдем сразу к результатам. Пусть  $x \gg 1$  ( $R \ll R_0$ ), что соответствует достаточно острой функции распределения  $f(R, t)$  и

малой степени кристаллизации ( $\eta^{1/3} \ll 1$ ). Тогда  $R_0(R)$  будет иметь вид

$$R_0(R) = \frac{R}{2(1 + \gamma_0)} \times \left[ \lambda + \left(\frac{\bar{R}}{R}\right)^{2/3} \cdot \lambda^{1/3} \frac{2(1 + \gamma_0) - \eta^{1/3}}{\eta^{1/3}} \right], \quad (19)$$

где  $\lambda \equiv (1 + \gamma_0)/(1 + \gamma)$ .

Рассмотрим два предельных случая.

1. Если  $\beta \rightarrow 0$ , то рост или плавление зародышей лимитируется граничной кинетикой. В этом случае  $R_0(R)$  можно записать в следующем виде:

$$R_0(R) = \frac{R^{2/3} \bar{R}^{1/3}}{\eta^{1/3}} \sim R^{2/3}. \quad (20)$$

Если  $\beta \rightarrow \infty$  (рост или плавление зародышей лимитируется теплоотводом, а граничная кинетика не играет роли), то получаем

$$R_0(R) = \frac{R}{2} \left[ 1 + \left(\frac{\bar{R}}{R}\right)^{2/3} \frac{2 - \eta^{1/3}}{\eta^{1/3}} \right] \simeq \frac{R^{1/3} \bar{R}^{2/3}}{\eta^{1/3}} \sim R^{1/3}. \quad (21)$$

Таким образом, из решения системы (9), (10) мы получили выражения для потока (16), определяемого стоком тепла из системы, и для радиуса зоны влияния (19)–(21). Теперь необходимо найти обменный поток  $q_0$ . Получим решение уравнения (12) с граничными условиями (13). В области эффективной среды ( $r \geq R_0$ ) для случайного распределения зародышей по размерам и положению можно записать выражение для усредненного потока тепла  $\tilde{I}(r)$

$$\tilde{I}(r) = \int_0^\infty 4\pi R^2 [\langle q_{0R}(r) \rangle + q_{1R}] f(R, t) dR. \quad (22)$$

Здесь  $\langle q_{0R} \rangle$  — усредненный обменный поток на зародыш радиуса  $R$ ,  $q_{1R}$  — независимая от  $r$  величина потока  $q_1$  на зародыш. Суммарный поток тепла  $I$  от всех зародышей в системе можно представить в виде

$$I = \frac{1}{V} \sum_i \oint_{S_i} \mathbf{q} d\mathbf{S}_i = - \int_0^\infty 4\pi R^2 (\bar{q}_{0R} + q_{1R}) f(R, t) dR. \quad (23)$$

Записав  $\langle q_{0R} \rangle$  в виде

$$-\langle q_{0R} \rangle = \chi \varphi(R) (\bar{T}_0 - T_R) + \chi \varphi(R) (\langle T_0 \rangle - \bar{T}_0), \quad (24)$$

где функция  $\varphi(R)$  подлежит определению, и комбинируя (22)–(24) имеем выражение для  $\bar{I}$

$$\bar{I} = I + \frac{\chi}{l^2} [\langle T_0 \rangle - \bar{T}_0],$$

где  $l^{-2} = 4\pi \int_0^\infty R^2 \varphi(R) f(R, t) dR$ .

Теперь уравнение (12) можно привести к виду

$$-\operatorname{div} \mathbf{q}_0 - \frac{\chi}{l^2} (T_0 - \bar{T}_0) \Theta(r - R_0) + \left[ K(1 - \eta) - I - \rho C_P \frac{dT}{dt} \right] \Theta(r - R_0) = 0. \quad (25)$$

Выражение в квадратных скобках в уравнении (25) не зависит от  $\mathbf{r}$  и для существования физического (ограниченного при  $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ ) решения должно обращаться в нуль, что соответствует условию теплового баланса

$$K(1 - \eta) = C_P \frac{dT}{dt} \rho + I. \quad (26)$$

Таким образом, уравнение (12) переходит в следующее уравнение:

$$-\operatorname{div} \mathbf{q}_0 - \frac{\chi}{l^2} (T_0 - \bar{T}_0) \Theta(r - R_0) = 0, \quad (27)$$

$$\chi \frac{dT_0}{dr} \Big|_{r=R} = \beta [T_0(R) - T_R], \quad T_0 \Big|_{r \rightarrow \infty} = \bar{T}_0. \quad (28)$$

Отметим, что параметр размерности длины  $l$  в уравнении (27), зависящий от функции распределения, имеет физический смысл длины экранировки тепловых потоков на данный зародыш. Ниже мы получим выражение для этого показателя.

Решение уравнения (27) с краевыми условиями (28) не представляет принципиальных трудностей, поэтому выпишем теперь сразу вид потока  $\bar{q}_{0R}$

$$-\bar{q}_{0R} = \frac{\chi}{R \left( 1 - \frac{R}{R_0 + l} \right) + \frac{\chi}{\beta}} (\bar{T}_0 - T_R), \quad (29)$$

где длина экранировки тепловых потоков  $l$  определяется из уравнения

$$l^2 = \frac{1}{4\pi N \bar{R}} \left[ 1 + \gamma_0 - \frac{\bar{R}}{R_0(\bar{R}) + l} \right].$$

Приведем теперь формулу для скорости роста зародыша с учетом экранирования тепловых полей

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{\rho L} (\bar{q}_{0R} + q_{1R})$$

и, подставляя значения  $\bar{q}_{0R}$  и  $q_{1R}$ , имеем, например, при  $\beta \rightarrow 0$ , т.е. когда скорость роста частицы лимитирует

скорость встраивания атомов, выражение для  $dR/dt$  в виде

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\beta \alpha}{RL \rho_s} \left[ \frac{R}{R_{cr}} - \frac{K}{3} \left( \frac{1}{R^{1/3}} \sqrt{\frac{(1-\eta)^{1/3}}{\eta}} \times \left( \frac{1}{3/4\pi N} \right)^{1/9} - R^2 \right) \right]. \quad (30)$$

Сравнивая выражение (30) с формулой для скорости роста зародышей без учета экранирования тепловых полей [5], видим, что при росте степени кристаллизации  $\eta$  скорость роста сравнительно падает. Отметим, что полученные выше результаты получены в приближении достаточно малой степени кристаллизации. Перейдем теперь к рассмотрению поздней стадии фазового перехода первого рода, когда происходит срастание частиц в сплошное поликристаллическое твердое тело и степень кристаллизации стремится к единице.

### Учет "столкновений" зародышей новой фазы на стадии оствальдовского созревания

В работах [5,6], посвященных теории оствальдовского созревания при кристаллизации расплава, используется приближение нулевой объемной доли зародышей новой фазы в расплаве. По мере увеличения объема новой фазы влияние столкновений<sup>1</sup> зародышей на их распределение по размерам должно становиться более значительным. Например, столкновение зерен новой фазы происходит при кристаллизации расплава на стадии образования сплошного поликристаллического твердого тела [6].

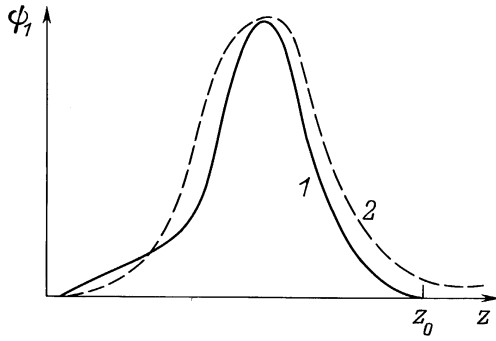
Запишем систему уравнений, описывающую тепловое оствальдовское созревание ансамбля зародышей в однокомпонентном расплаве с учетом ненулевой объемной доли новой фазы. Эта система состоит из уравнения неразрывности (31), в которое включен интеграл столкновений  $I_{ст}$ , уравнение баланса тепла (32) и выражение для скорости роста зародышей в общем виде (33)

$$\frac{\partial f(R, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} [f(R, t) V_R] = I_{ст}, \quad (31)$$

$$Q_0 = Q(t) + \frac{4}{3} \pi L \rho_s \int_0^\infty f(R, t) R^3 dR, \quad (32)$$

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\text{const}}{R^{p-1}} \left( \frac{R}{R_{cr}} - 1 \right). \quad (33)$$

<sup>1</sup> Под столкновением мы будем понимать непосредственное слияние или расплавление зародышей с меньшими радиусами, попавших в зону влияния (см. выше) более крупных частиц. За счет поглощенного при плавлении тепла происходит рост большей частицы. Возможное незначительное поглощение выделившегося при плавлении тепла другими частицами мы не будем учитывать.



Вид функции распределения частиц по размерам: 1 — без учета ненулевой объемной доли новой фазы [5], 2 — с учетом ненулевой объемной доли новой фазы.

Здесь  $L$  — скрытая теплота плавления;  $\rho_s$  — плотность доли частиц новой фазы;  $f(R, t)$  — функция распределения островков по размерам;  $I_{ст}$  — интеграл столкновений;  $Q(t)$  — количество тепла в расплаве в данный момент времени;  $const$  — константа в уравнении для скорости роста зародыша [5];  $Q_0$  — количество тепла в расплаве к моменту начала остальдовского созревания.

Для того чтобы учесть столкновения зародышей, мы воспользуемся методом, развитым Лифшицем и Слезовым в работе [11], посвященной распаду пересыщенных твердых растворов. Действительно, в [5] показано, что уравнения, описывающие тепловое и диффузионное остальдовское созревание ансамбля зародышей новой фазы в безразмерном виде, имеют одинаковую математическую структуру. Воспользуемся этим аппаратом и введем относительные переменные  $u = R/R_{cr}(t)$ , а в качестве "времени" будем использовать величину  $\tau = \ln x^2$ , где  $x = \Delta T/\Delta T_0$ ,  $\Delta T$  и  $\Delta T_0$  — соответственно текущее и начальное переохлаждение расплава.

Выбрав начало координат в некотором зародыше, заметим, что все остальные зародыши будут двигаться к выбранному центру (так как координаты центров зародышей  $r_i$  не меняются,  $R_{cr}(x) \rightarrow \infty$ ). При этом большая часть зародышей расплавляется, не достигнув выбранного центра, и столкновения не происходит. Запишем полную систему уравнений, описывающую процесс теплового остальдовского созревания с учетом столкновения зерен в относительных переменных  $u$  и  $\tau$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial u} \left( \varphi(u, \tau) \frac{du}{d\tau} \right) = I_{ст},$$

$$\varphi|_{\tau=0} = \varphi_0, \tag{34}$$

$$1 - \frac{\Delta_0 T}{Q_0} l^{-\tau/3} = l^\tau \int_0^\infty \varphi(u, \tau) u^3 du, \tag{35}$$

$$\frac{du^3}{d\tau} = (u - 1)\gamma - u^3. \tag{36}$$

Здесь (34) — уравнение неразрывности в пространстве переменных  $u, \tau$ ; (35) — уравнение баланса тепла в новых переменных; (36) — скорость роста островка. Уравнение (35) описывает баланс тепла в системе, выражение (36) — безразмерная скорость роста зародышей,  $\varphi$  — безразмерная функция распределения. Отметим, что система (34)–(36) математически идентична системе, описанной в работе [11], и может быть решена тем же методом. Выпишем теперь сразу же выражение для безразмерной функции распределения частиц по размерам с учетом "столкновений" в первом приближении  $\varphi_1(\tau, z)$ , где  $z = R^3/R_{cr}^3$ ,

$$\varphi_1 = \begin{cases} \frac{1}{e^\tau} \frac{1}{\tau_{ст}} \frac{e^{-\psi}}{\beta} & z \leq z^0 \quad A = \int_{z'}^{2z^0} e^{\psi^*} I_{ст}^0(z') dz', \\ \frac{1}{e^\tau} \frac{1}{\tau_{ст}} \frac{e^{-\psi^*}}{\beta} \int_z^{2z^0} e^{\psi} I_{ст}(z') dz' & z^0 \leq z < 2z^0, \\ 0 & z \geq 2z^0. \end{cases} \tag{37}$$

Здесь  $\psi =$

$$\begin{cases} \psi^* + \Delta & z > z^0 \quad \psi^* = \frac{4}{3} \ln(\sqrt{z} + 3) + \frac{5}{3} \ln|\sqrt{z} - \sqrt{z^0}| \\ & + \frac{1}{1 - \sqrt{\frac{z}{z^0}}} - \ln \frac{3^3 e}{2^{5/3}}, \\ \psi^* & z < z^0 \quad \Delta = \frac{3\pi}{2\sqrt{\frac{3}{4} \frac{\Delta\gamma}{\gamma_0}}} \quad \Delta\gamma = \gamma_0 - \gamma > 0. \end{cases}$$

Интеграл столкновений имеет вид

$$I_{ст} = \frac{1}{\chi} \frac{1}{\tau_{ст}} \frac{3\mu}{4\pi} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{1}{e^{2\tau}} \omega(z - z', z') \varphi(z - z', \tau) \times \varphi(z', \tau) dz' - \frac{1}{e^\tau} \varphi(z, \tau) \int_0^\infty \frac{1}{e^\tau} \omega(z, z') \right\}.$$

Здесь  $\omega(z, z')$  — относительный эффективный объем, в котором зародыши  $z$  взаимодействуют с зародышами  $z'$ . Относительное время столкновения порядка единицы  $t_{ст} \simeq 1$ , так как в выражении, описывающем плавление меньшего зерна при столкновении,  $du^3/d\tau \simeq -\gamma - u^3$  и в начальных условиях  $u|_{\tau=0} = u_0 \simeq 1$  все параметры порядка единицы.

На рисунке представлен вид этой функции. Видно, что у функции распределения (37) имеется "хвост", ответственный за формирование частиц больших размеров.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 96-03-32396, 98-03-32791) и Российского федерального центра "Интеграция" (Проект № 589).

## Список литературы

- [1] *Скрипов В.П., Коверда В.П.* Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. М.: Наука, 1984. 231 с.
- [2] *Слезов В.В., Кукушкин С.Ф.* // ФТТ. 1996. Т. 38. Вып. 2. С. 433–442.
- [3] *Осипов А.В.* // ФТТ. 1996. Т. 36. Вып. 10. С. 1213–1219.
- [4] *Kukushkin S.A., Slyosov V.V.* // J. Phys. Chem. Solids. 1996. Vol. 57. N 2. P. 195–204.
- [5] *Кукушкин С.А.* // ФТТ. 1985. Т. 27. Вып. 10. С. 2987–2991.
- [6] *Кукушкин С.А., Григорьев Д.А.* // ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 10. С. 154–166.
- [7] *Децик В.Н., Кукушкин С.А., Осипов А.В.* // ФТТ. 1997. Т. 39. Вып. 1. С. 118–123.
- [8] *Слезов В.В.* // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 8. С. 20–30.
- [9] *Коропов А.В., Остапчук П.Н., Слезов В.В.* // ФТТ. 1991. Т. 33. Вып. 10. С. 2835–2844.
- [10] *Лифшиц И.М., Слезов В.В.* // ФТТ. 1958. Т. 1. Вып. 10. С. 1401–1412.
- [11] *Marder M.* // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 36. P. 858–864.