

О. С. Роїк, С. О. Лисовенко, В. М. Перевертайло,  
В. П. Казіміров, О. Б. Логінова (м. Київ)

### Моделювання та аналіз структури бінарних розплавів системи Ni—Mn

З використанням методу оберненого Монте-Карло і експериментальних кривих структурного фактора отримано структурні моделі бінарних розплавів Ni—Mn. Аналіз локальної атомної структури проведено за допомогою статистично-геометричного методу Вороного-Делоне. Встановлено, що за виключенням математичного сподівання та дисперсії розподілу коефіцієнта сферичності поліедрів Вороного, концентраційні залежності структурних параметрів розплавів Ni—Mn мають адитивний характер. Аналіз метричних характеристик поліедрів свідчить про реалізацію цільного некристалічного пакування атомів у досліджених розплавах, частка якого зростає зі вмістом мангану, досягаючи максимального значення в околі розплаву  $Ni_{66,7}Mn_{33,3}$ . Однак для розплаву, який відповідає азеотропній точці на діаграмі стану Ni—Mn, характерне підсилення взаємодії між атомами Ni—Mn та Mn—Mn. Це перешкоджає утворенню некристалічного цільного пакування та підсилює різноманітність в локальному оточенні атомів для розплаву в цій точці.

**Ключові слова:** метод RMC, просторовий кут, метод Вороного-Делоне, поверхневий натяг, міжатомна взаємодія, структурний фактор

**Вступ.** Отримання синтетичних кристалів алмазу з метал-вуглецевих розплавів в умовах високого тиску та температури [1] є добре апробованим та технологічно розробленим методом. При цьому ефективними ростовими середовищами є бінарні розплави Ni—Mn та Fe—Mn, які не тільки добре змочують і розчиняють вуглець, але й мають оптимальні  $p$ ,  $T$ -умови утворення кристалів. Переважна кількість публікацій на теренах СНД по вирощуванню синтетичних алмазів припадає на систему Ni—Mn—C, де оптимальні  $p$ ,  $T$ -умови відповідають сплаву складу 60 % (ат.) Ni і 40 % (ат.) Mn. Вибір співвідношення між нікелем та манганом обумовлений також найнижчою температурою плавлення в системі, що має суттєві переваги для проведення процесу кристалізації алмазу. Одним із найменш висвітлених є питання впливу структури металічного розплаву на процес кристалізації алмазів, а також концентраційна залежність локальної структури атомів і її взаємозв'язок із фізико-хімічними властивостями.

Надійним методом прямого експериментального дослідження структури розплавів є дифракційний, який дає можливість отримати криву інтенсивності променів, розсіяних досліджуваним об'єктом в певному кутовому інтервалі. Традиційна методика обробки отриманих дифракційних даних передбачає розрахунок усереднених значень структурних параметрів, наприклад, найбільш ймовірну відстань між атомами з найближчого оточення, площу першого максимуму кривої розподілу атомів, положення та висоту першого максимуму кривої структурного фактора, які є недостатніми для

детального кількісного аналізу локальної структури та характеру пакування атомів в розплаві. Сучасна методика дослідження атомної структури неупорядкованих систем передбачає проведення дифракційного експерименту, реконструкцію тривимірних моделей з експериментальних кривих структурного фактора (СФ) та їх комплексне дослідження за допомогою статистично-геометричного методу Вороного-Делоне [2]. Такий підхід дозволяє суттєво підвищити інформативність дифракційних досліджень та візуалізувати за допомогою комп'ютерної техніки характер та закономірності пакування атомів.

Поверхневі властивості розплавів значною мірою обумовлені структурою ближнього порядку, що дозволяє віднести їх до категорії структурно-чутливих, тому сумісний розгляд результатів дифракційного експерименту та поверхневих властивостей розплавів дозволяє робити більш обґрунтовані висновки про характер розташування атомів в рідкому стані.

Метою даної роботи було рентгенодифракційне дослідження, моделювання та детальний аналіз отриманих структурних моделей розплавів системи Ni—Mn в широкому концентраційному інтервалі з врахуванням даних про густину та поверхневий натяг.

**Матеріали та методика експерименту.** Зразки сплавів готували з електролітичних Ni (99,95 %) та Mn (99,7 %) сплавленням компонентів в електродуговій печі КПТМ-2 з невитратним вольфрамовим електродом в мідному водоохолоджуваному тиглі в середовищі аргону. Зміна маси зразків в процесі виплавки не перевищувала 0,35 %.

Густину  $\rho$  та поверхневий натяг  $\sigma_{\text{pr}}$  розплавів системи Ni—Mn при температурі 1250 °C вимірювали методом великої краплі в чашках із  $\text{Al}_2\text{O}_3$  в вакуумі  $3 \cdot 10^{-3}$  Па.

Рентгенодифракційне дослідження розплавів системи Ni—Mn проводили на автоматичному  $\theta$ — $\theta$  дифрактометрі в середовищі гелію високої чистоти з використанням МоК $\alpha$ -випромінювання, монохроматизованого парою диференціальних збалансованих фільтрів, виготовлених з  $\text{ZrO}_2$  та  $\text{Y}_2\text{O}_3$ , розташованих в дифрагованому пучку. Криві інтенсивності розсіяних променів було отримано в інтервалі значень кутів розсіювання  $6$ — $90^\circ$ : з кроком  $0,25$  град в інтервалі  $6$ — $50^\circ$  та  $0,5$  град в інтервалі  $50$ — $90^\circ$  (з реєстрацією сцинтиляційним лічильником). Оскільки метою дослідження було встановлення концентраційної залежності параметрів локальної структури при однаковому ступені перегріву поблизу лінії ліквідус, то всі розплави Ni—Mn досліджували при температурах на  $\sim 50$  град вище температури плавлення.

При обробці експериментальних кривих враховували поправки на поляризацію рентгенівських променів і кутову залежність некогерентного розсіювання. Нормування до електронних одиниць здійснювали за рівнянням Вайнштейна з використанням атомних факторів та поправок на аномальну дисперсію [3] з подальшим розрахунком кривих структурного фактора  $a(S)$  ( $S = 4\pi \sin \theta / \lambda$  — вектор дифракції,  $\theta$  — половина кута розсіювання,  $\lambda$  — довжина хвилі рентгенівського випромінювання). Методика розрахунку кривих СФ та функцій парного розподілу атомів детально описана в [4].

Структурні моделі розплавів були реконструйовані з експериментальних кривих СФ за допомогою методу оберненого Монте-Карло, який відомий у літературі як Reverse Monte Carlo (RMC) [5]. Вихідна конфігурація містила 5000 атомів в основній комірці в стехіометричному співвідношенні, що відповідає складу розплаву. Координати атомів у вихідній атомній конфігурації задавали випадковим чином. При цьому розміри модельного куба

узгоджувались з густиною розплаву при температурі дослідження. Оптимізацію моделі здійснювали шляхом мінімізації виразу

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N (a^M(S_i) - a^E(S_i))^2 / \sigma^2(S_i), \quad (1)$$

де  $a^M(S)$  та  $a^E(S)$  — модельний та експериментальний структурні фактори відповідно, а  $\sigma(S)$  — експериментальна похибка. Оскільки розподіл систематичних похибок для дифракційного експерименту невідомий, то була використана стандартна величина  $\sigma(S)$ , яка складала 1 %.

Отримані структурні моделі розплавів аналізували в рамках формалізму статистично-геометричного методу Вороного-Делоне [6]. Суть методу полягає в тому, що для кожного атома системи будують поліедр Вороного (ПВ). Всі ці багатогранники випуклі і однозначно заповнюють простір моделі. ПВ визначає геометричне місце точок, відстань від яких до центрального атома менша або дорівнює відстані до будь-якого іншого атома системи. Тобто, ПВ характеризує ближнє оточення атома, іншими словами — є геометричною репрезентацією локального порядку в моделі. Топологічні і метричні характеристики ПВ дозволяють кількісно сформулювати статистичні закономірності локального оточення атомів.

Основними метричними характеристиками ПВ є його об'єм та площа поверхні. Для кількісної міри ПВ використовують безрозмірну величину:  $K_{\text{сф}}$  — коефіцієнт сферичності ( $K_{\text{сф}} = 36\pi V^2/A^3$ , де  $A$  — площа багатогранника), який дорівнює одиниці для сфери. По мірі наближення форми поліедра до сфери  $K_{\text{сф}} \rightarrow 1$ . Тобто, зі збільшенням щільності пакування зростає значення коефіцієнта сферичності для ПВ атомної системи. Для прикладу, на рис. 1 наведено ПВ для різних типів пакувань: найбільш близька до сферичної форма поліедра для ГЦК ґратки і найменш — для ґратки алмазу, де присутня направлена ковалентна взаємодія між атомами. Для прикладу, коефіцієнт сферичності куба (кубічна ґратка) становить 0,5236, а  $K_{\text{сф}}$  ромбододекаедра, який відповідає більш щільному пакуванню атомів (ГЦК ґратка), дорівнює 0,7405. В некристалічних системах, де існує велика кількість різних за формою ПВ, для аналізу пакування атомів, як правило, використовують математичне сподівання кривої розподілу коефіцієнта сферичності ПВ. Так, для аморфної фази математичне сподівання  $K_{\text{сф}}$  становить  $\sim 0,72$ , для рідкої фази — біля 0,70, а для менш щільної неупорядкованої тетраедричної сітки — приблизно 0,475 [6].

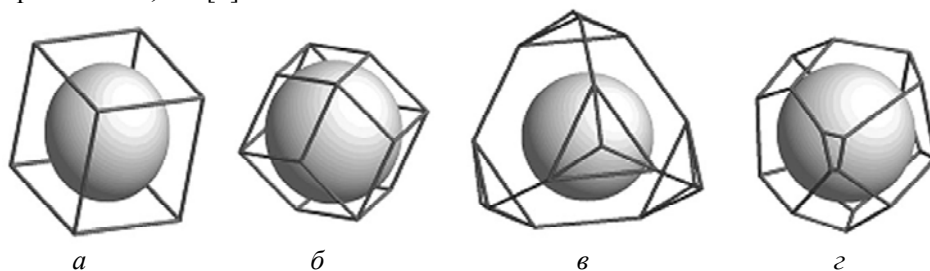


Рис. 1. Поліедри Вороного, побудовані навколо атомів для простої кубічної ґратки (а), ГЦК ґратки (б), ґратки алмазу (в) та щільного некристалічного пакування (з) [6].

Іншим способом аналізу структурної моделі є розбиття її на симплекси Делоне (СД) та детальний аналіз їх взаємного розміщення. Симплекси Делоне задають четвіркою атомів, причому в сферу, описану навколо цих атомів,

не може потрапити жоден інший атом. Фактично окремий СД визначає елементарну порожнину системи. Більш великі атомні порожнини атомної системи являються об'єднанням декількох СД.

**Результати та їх обговорення.** На рис. 2 наведено експериментальні та модельні структурні фактори для розплавів Ni—Mn при температурах на  $\sim 50$  град вище температури плавлення. Відповідність розрахованих з RMS моделей та експериментальних СФ вказує на адекватність реконструйованих моделей реальній структурі досліджуваних розплавів. Як видно, при збільшенні вмісту Ni в досліджуваних розплавах відбувається поступова зміна форми кривих СФ.

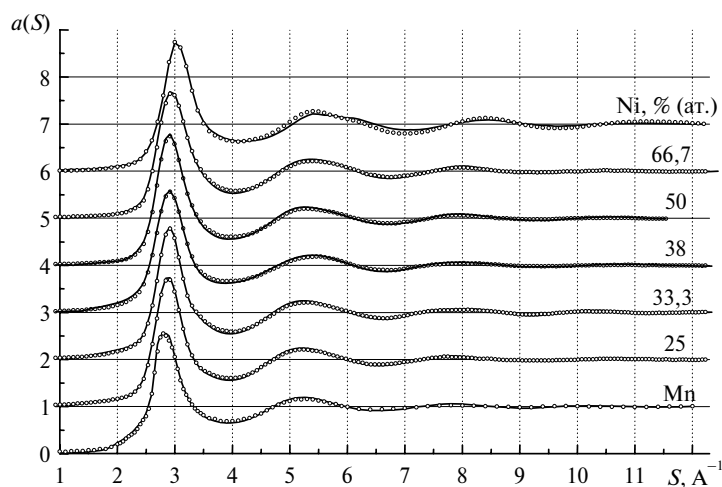


Рис. 2. Експериментальні (точки) і модельні (лінії) криві структурного фактора розплавів Ni—Mn.

З кривих СФ було розраховано функції парного розподілу атомів  $g(R)$  та структурні параметри локального впорядкування атомів у розплавах, які наведено в таблиці. Концентраційна залежність  $R_1$  — найбільш імовірної міжатомної відстані в розплавах (рис. 3) — має, в основному, адитивний характер з невеликими додатними відхиленнями. Однак слід зазначити, що для розплаву  $\text{Ni}_{38}\text{Mn}_{62}$  спостерігається деяке скорочення міжатомної відстані.

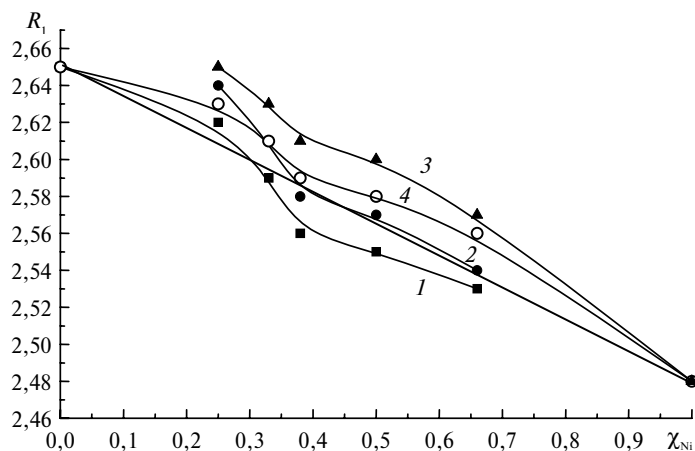


Рис. 3. Залежність положення першого максимуму на кривій  $g(R)$  від атомної частки нікелю в розплаві Ni—Mn: 1 — Mn—Mn; 2 — Ni—Mn; 3 — Ni—Ni; 4 — загальне.

На думку авторів, це пов'язано з деяким підсиленням міжатомної взаємодії у рідкому стані, оскільки вказаний склад відповідає азеотропній точці на діаграмі стану Ni—Mn [7].

### Структурні параметри розплавів Ni—Mn

Mn, % (ат.)	$t, ^\circ\text{C}$	$s_1, \text{Å}^{-1}$	$R_1, \text{Å}$ (загальна)	$R_1, \text{Å}$ (парціальна)		
				Mn—Mn	Mn—Ni	Ni—Ni
0	1550	3,04	2,48			2,48
33	1233	2,96	2,56	2,53	2,54	2,57
50	1106	2,93	2,58	2,55	2,57	2,6
62	1068	2,93	2,59	2,56	2,58	2,61
66	1082	2,92	2,61	2,59	2,61	2,63
75	1124	2,9	2,63	2,62	2,64	2,65
100	1260	2,83	2,65	2,65		

Парціальні криві функції парного розподілу атомів були отримані зі структурних моделей розплавів, що дало можливість розрахувати парціальні міжатомні відстані  $R_1(i-j)$  для локального оточення атомів. З наведеної концентраційної залежності (див. рис. 3) видно, що найбільш короткі відстані реалізуються між атомами маргану, а найбільші — між атомами нікелю. Зменшення загальної відстані  $R_1$  для розплаву  $\text{Ni}_{38}\text{Mn}_{62}$  в першу чергу обумовлено скороченням відстаней Ni—Mn та Mn—Mn.

З рис. 4 видно, що концентраційна залежність математичного сподівання розподілу коефіцієнта сферичності ПВ характеризується, в основному, додатними відхиленнями від адитивності, що свідчить про досить щільне пакування атомів у розплавах. Разом з тим, значення коефіцієнтів сферичності  $K_{\text{сф}}$  помітно зменшується для розплаву  $\text{Ni}_{38}\text{Mn}_{62}$ , що свідчить про зменшення щільності пакування атомів. Це характерно як для поліедрів, побудованих навколо атомів Ni, так і для поліедрів, побудованих навколо атомів Mn. Зменшення щільності пакування атомів для структурної моделі розплаву  $\text{Ni}_{38}\text{Mn}_{62}$  є проявом існування більш коротких зв'язків Mn—Mn та Ni—Mn порівняно зі зв'язками Ni—Ni, що, в свою чергу, свідчить про наявність ковалентної складової у хімічному зв'язку між атомами Mn—Mn та Ni—Mn.

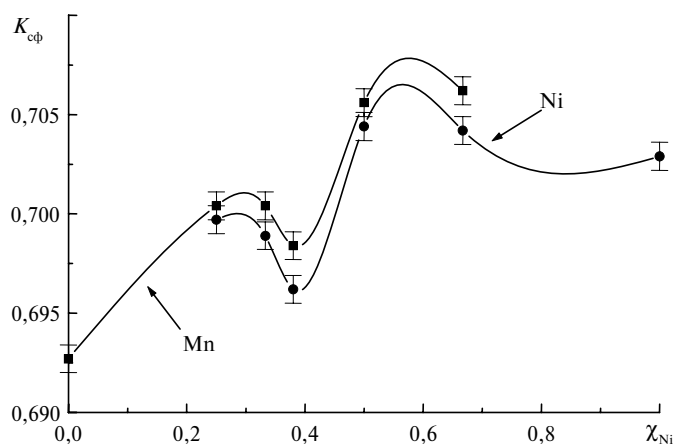


Рис. 4. Залежність математичного сподівання коефіцієнта сферичності від мольної частки Ni в розплаві Ni—Mn.

Дисперсія коефіцієнта сферичності  $\sigma$  (рис. 5), яка характеризує ступінь однорідності пакування атомів, відхиляється від адитивної залежності в бік менших значень для Mn і для Ni (особливо у випадку розплаву  $\text{Ni}_{66,7}\text{Mn}_{33,3}$ ), що свідчить про утворення щільного некристалічного пакування атомів в розплавах Ni—Mn. Отримані дані корелюють із концентраційною залежністю надлишкової ентропії сплавоутворення [7] (рис. 6), яка має мінімальне від'ємне значення для розплаву зі вмістом 30 % (ат.) Ni. На кривій концентраційної залежності  $\sigma$  в точці, яка відповідає 38 % (ат.) Ni, спостерігається максимальне значення цієї величини, що особливо характерно для поліедрів, побудованих навколо атомів Ni. Це також підтверджує висновок про наявність деякої направленості зв'язків в розплаві при вмісті  $\sim 38$  % (ат.) Ni.

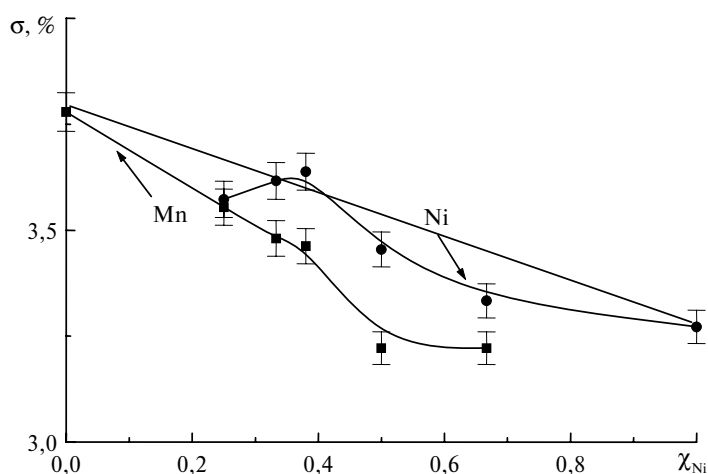


Рис. 5. Залежність дисперсії коефіцієнта сферичності від мольної частки Ni в розплаві Ni—Mn.

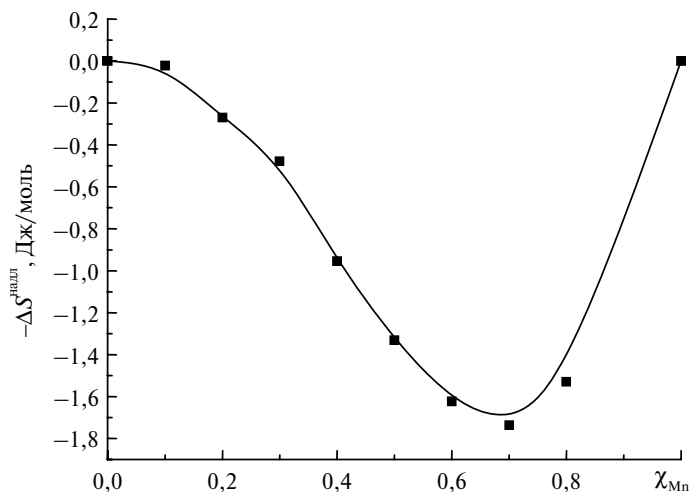


Рис. 6. Надлишкова ентропія змішування для розплаву Ni—Mn [7].

Найбільш щільне пакування має четвірка атомів, що утворює правильний тетраедр. Однак правильними тетраедрами неможливо повністю (без розривів) заповнити тривимірний простір, тому кристалічне щільне пакуван-

ня являє собою набір тетраедричних та октаедричних пустот, які певним чином впорядковані одні відносно одних. У некристалічних системах тетраедри замикаються в п'ятичленні кільця, утворюючи семиатомну фігуру — декаедр [2, 6]. Дана фігура містить сім атомів у вершинах. П'ять атомів лежать практично в одній площині, утворюючи п'ятикутник (екваторіальне кільце), ступінь правильності якого залежить від деформації тетраедрів. Два інших атоми розташовуються зверху і знизу. Слід зазначити, що тетраедри, які утворюють декаедр, не можуть бути правильними: загальне ребро, яке сполучає полюси декаедра, відрізняється від ребер в екваторіальному кільці приблизно на 5%. Дане пакування тетраедрів неможливе в кристалічних тілах, воно є властивістю виключно некристалічних систем. Декаедри, об'єднуючись та входячи одні в одних, утворюють кластери, які мають нанометрові розміри, причому деформація тетраедрів зростає від центра кластера в напрямку його границь, поступово утворюючи відмінний від вище вказаного (менш щільний) тип пакування атомів.

Для оцінки величини відносної інтенсивності міжатомної взаємодії в розплавах зручно використовувати таку характеристику як просторовий кут грані поліедра. Ця величина визначається площею проекції грані на одиничну сферу з центром на атомі, навколо якого побудований поліедр. Просторовий кут грані можна інтерпретувати як частку електронів атома, розділених з сусідом, з яким утворена дана грань. Виходячи з цього, в [8] була введена величина валентного зусилля  $s$ , яке визначається з рівняння

$$s = \frac{\zeta \Omega}{4\pi}, \quad (2)$$

де  $\zeta$  — ступінь окиснення центрального атома;  $\Omega$  — просторовий кут в стерadianах.

У випадку металічного розплаву, якщо виходити з припущення, що міжатомний простір рівномірно заповнює електронний газ, доцільно розглядати лише просторовий кут безвідносно до ступеня окиснення центрального атома.

Приклад розподілу просторових кутів для розплаву, який відповідає складу 38% (ат.) Ni, показано на рис. 7. Видно, що криві розподілу для зв'язків Ni—Mn, Mn—Mn лежать досить близько одна до однієї, вказуючи на незнач-

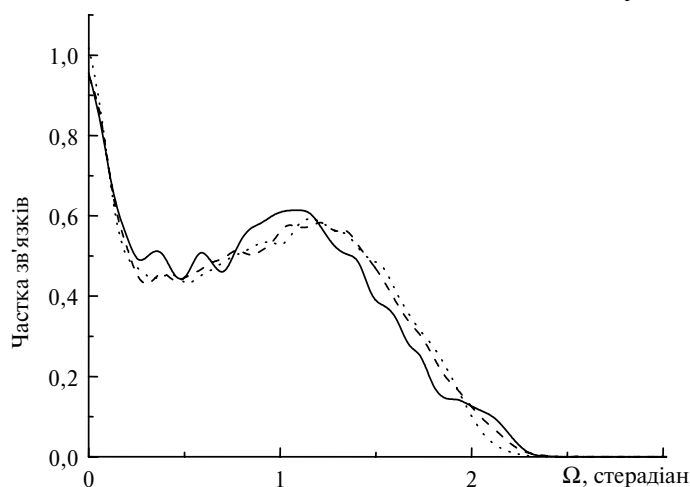


Рис. 7. Розподіл просторових кутів для розплаву Ni—Mn зі вмістом 38% (ат.) Ni: Ni—Ni (—), Ni—Mn (---), Mn—Mn (· · ·).

ну різницю у величині міжатомної взаємодії. Зсув піка для зв'язків Ni—Ni в бік менших значень вказує на те, що в розплаві інтенсивність взаємодії в парах Ni—Mn та Mn—Mn більша, ніж в парах Ni—Ni. Значні коливання дисперсії розподілу просторових кутів (рис. 8) свідчать про її зростання в околі азеотропної точки зі вмістом 38 % (ат.) Ni. Це, на думку авторів, обумовлено відносно більшою різноманітністю локального оточення атомів. Тобто, в розплавах Ni—Mn атоми намагаються реалізувати щільне некристалічне пакування, частка якого зростає зі збільшенням вмісту нікелю. Однак в околі розплаву  $\text{Ni}_{38}\text{Mn}_{62}$  посилюється взаємодія між атомами Ni—Mn та Mn—Mn, що перешкоджає реалізації щільного некристалічного пакування. Як наслідок, локальне оточення атомів формується двома конкуруючими факторами: некристалічним щільним пакуванням атомів в металічних розплавах та елементами ковалентності у взаємодії між атомами нікелю та мангану, що і спричиняє відносно більше значення дисперсії розподілу просторових кутів.

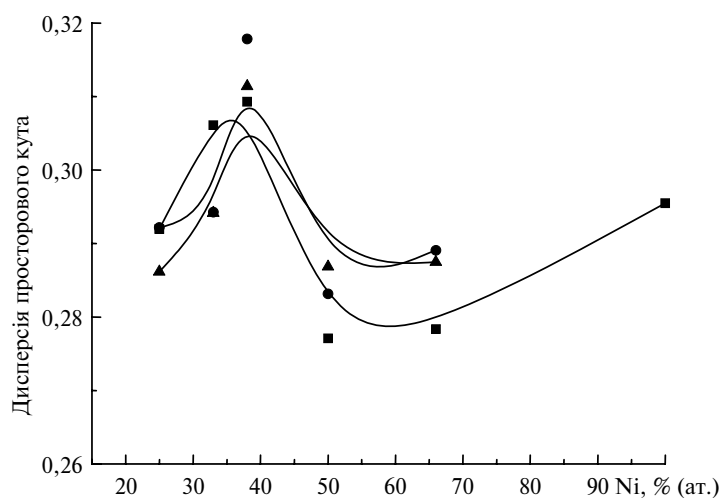


Рис. 8. Залежність дисперсії просторового кута від складу розплаву Ni—Mn: Ni—Ni (■), Ni—Mn (●), Mn—Mn (▲).

Слід додати, що отримані результати підтверджуються даними експериментальної кривої молярних об'ємів та поверхневого натягу розплавів системи Ni—Mn. Ізотерма молярних об'ємів Ni—Mn розплавів незначно відрізняється від адитивної прямої, що свідчить про незначну декомпресію в розплаві (рис. 9). Експериментальні ізотерми поверхневого натягу системи Ni—Mn проходять нижче ідеальних ізотерм, розрахованих згідно рівнянням Жуховицького та Павлова-Попеля [9, 10], хід яких показано на рис. 10 штриховими лініями. В той же час, у відповідності до класифікації ізотерм поверхневого натягу за Єременком [11], значні від'ємні відхилення від закону Рауля та надлишкова ентропія сплавоутворення в системі Ni—Mn повинні були б привести до появи додатних відхилень експериментальної ізотерми поверхневого натягу. Хід експериментальної ізотерми поверхневого натягу розплавів системи Ni—Mn може бути пояснено саме більшою інтенсивністю взаємодії в парах атомів Ni—Mn та Mn—Mn, ніж між атомами Ni—Ni. Імовірно, що системі Ni—Mn поверхнево-активними можуть бути не тільки окремі атоми хімічного елементу (мангану), що утворюють більш слабкі зв'язки з металом-розчинником (нікелем), але й структурні елементи рідини,



створені між парами атомів Ni—Mn або Mn—Mn, якщо енергія зв'язку між атомами, що утворюють даний структурний елемент, вища, ніж енергія зв'язку їх з основним металом-розчинником. Раніше ми спостерігали таке явище в системах з простими евтектиками [12].

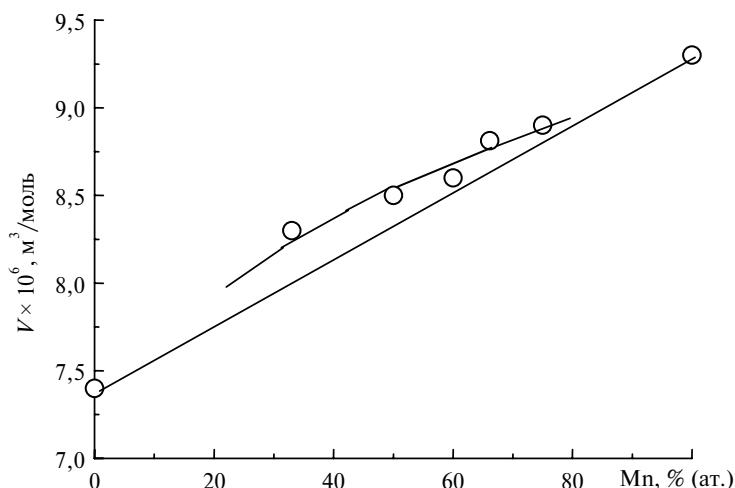


Рис. 9. Молярні об'єми розплавів системи Ni—Mn при 1250 °С.

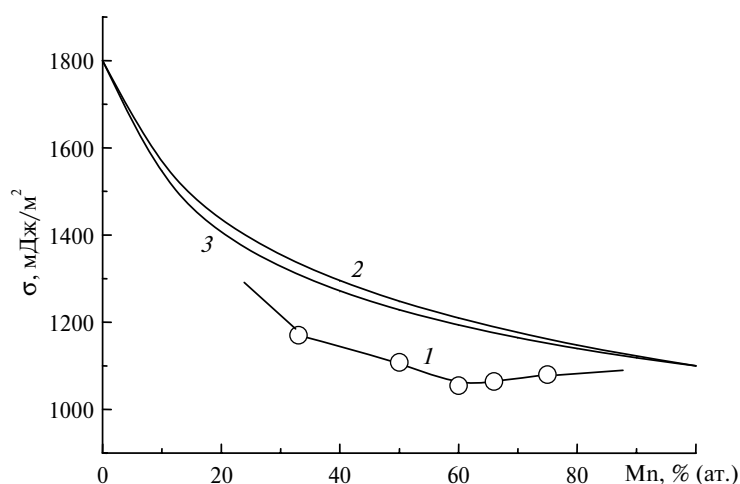


Рис. 10. Поверхневий натяг розплавів системи Ni—Mn: 1 — експеримент, 1250 °С, 2 — розрахунок за рівнянням Жуховицького, 1350 °С, 3 — розрахунок за рівнянням Павлова-Попеля, 1350 °С.

### Висновки

Отримано та детально проаналізовано структурні моделі розплавів Ni—Mn у всьому концентраційному інтервалі, що дозволило зробити ряд висновків. В цілому концентраційні залежності структурних параметрів розплавів Ni—Mn мають адитивний характер, за виключенням коефіцієнта сферичності та дисперсії коефіцієнта сферичності. Останні свідчать про реалізацію щільного некристалічного пакування атомів, частка якого зростає зі вмістом мангану, досягаючи максимального значення в околі розплаву  $\text{Ni}_{66,7}\text{Mn}_{33,3}$ . Однак для розплаву, який відповідає азеотропній точці на діаграмі стану Ni—Mn, характерне підсилення взаємодії між атомами Ni—

Mn та Mn—Mn. Це перешкоджає утворенню некристалічного щільного пакування та підсилює різноманітність в локальному оточенні атомів в цій точці.

В системах з наявністю декомпресії в розплаві поверхнево-активними можуть бути не тільки окремі атоми хімічного елементу, що утворюють більш слабкі зв'язки з металом-розчинником, але й структурні елементи рідини, в яких енергія зв'язку між атомами вища, ніж енергія зв'язку їх з основним металом-розчинником. Такі структурні елементи рідини можуть проявляти поверхневу активність в розплаві, що обумовлює появу екстремумів на експериментальних ізотермах густини та поверхневого натягу розплаву. Критерієм поверхневої активності в цьому випадку може бути поява ковалентної складової в структурі хімічного зв'язку між парами атомів розплаву.

1. *Синтетические сверхтвердые материалы*. В 3-х т. Т. 1. Синтез сверхтвердых материалов / Редкол.: Новиков Н. В. (отв. ред.) и др. — Киев: Наук. думка, 1986. — 280 с.
2. *Роик А. С., Казимиров В. П., Сокольский В. Э.* Моделирование и анализ структуры жидких металлов методами обратного Монте-Карло и Вороного-Делоне // Журн. структурной химии. — 2004. — **45**, № 4. — С. 683—691.
3. *Казимиров В. П., Смык С. Ю., Сокольский В. Э. и др.* К методике рентгенографического исследования расплавов // Расплавы. — 1996. — № 5. — С. 85—90.
4. *Авдюхина В. М., Батсурь Д., Зубенко В. В. и др.* Рентгенография. Спецпрактикум / Под общ. ред. А. А. Кацнельсона. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. — 240 с.
5. *McGreevy R. L.* Reverse Monte Carlo modeling // J. Phys. Condens. Matter. — 2001. — **13**, N 46. — P. R877—R913.
6. *Медведев Н. Н.* Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000. — 214 с.
7. *Баталин Г. И., Стукало В. А., Нецименко Н. Я., Пацелий Н. В.* Термодинамические свойства двойных жидких сплавов Mn—Ni // Журн. физ. химии. — 1981. — **55**, № 10. — С. 2469—2471.
8. *Балатов В. А., Серезжин Н. В.* Координационные числа атомов // Соросовский образовательный журн. — 1999. — № 7. — С. 91—97.
9. *Жуховицкий А. А.* Поверхностное натяжение растворов // ЖФХ. — 1944. — **18**, № 5/6. — С. 214—233.
10. *Попель С. И., Павлов В. В.* Термодинамический расчет поверхностного натяжения растворов // Поверхностные явления в расплавах и возникающих из них твердых фазах. — Нальчик: Кабард.-Балкар. кн. изд-во, 1965. — С. 46—60.
11. *Еременко В. Н., Василицу М. И.* Классификация жидких металлических систем по типам изотерм поверхностного натяжения // Укр. хим. журн. — 1972. — **38**, № 2. — С. 118—125.
12. *Перевертайло В. М., Логинова О. Б., Казимиров В. П., и др.* Характер упорядочения атомов в расплаве и поверхностные свойства простых эвтектических систем // Сверхтв. материалы. — 2008. — № 4. — С. 35—53.

Київський національний ун-т  
ім. Тараса Шевченка  
Ін-т надтвердих матеріалів  
ім. В. М. Бакуля НАН України

Надійшла 24.07.08