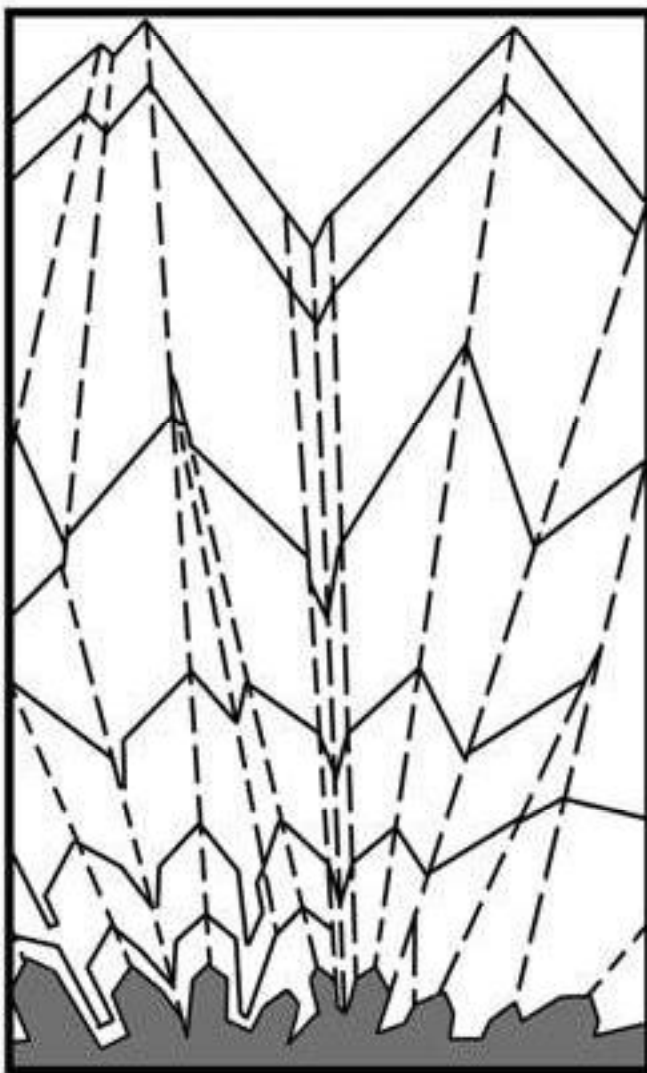




# Solidification

computer simulation,  
experiments and technology



Abstracts of 9<sup>th</sup> international conference  
Izhevsk, 6–9 April, 2022

Министерство науки и высшего образования РФ  
ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет»  
ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН»  
АО Научно-производственное объединение «МКМ»

# КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ: КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ, ЭКСПЕРИМЕНТ, ТЕХНОЛОГИИ

Тезисы  
IX Международной конференции  
6–9 апреля 2022 года

УдмФИЦ УрО РАН

Ижевск  
2022

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)  
ББК 34.3

Главный редактор П. К. Галенко  
Ответственный редактор Л. В. Камаева

К26 Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии: Тезисы IX Международной конференции. – Ижевск: Изд-во УдмФИЦ УрО РАН, 2022. – 258 с.

Solidification: computer simulation, experiments and technology: Abstracts of the IX internationale conference. – Izhevsk: UdmFRC UB RAS Publ., 2022. – 258 p.

**ISBN 978-5-6047339-4-3**

Настоящий сборник содержит тезисы докладов участников IX международной конференции «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС-2022, 6–9 апреля 2022 года, УдГУ), посвященной актуальным проблемам теории, эксперимента и разработки компьютерных технологий процессов макро- и микроскопической кристаллизации.

Рассмотрены процессы структурообразования в сплавах, процессы высокоскоростной кристаллизации, современные проблемы в областях атомистической динамики, аморфных систем, образования микроструктур и старения сплавов, а также связанные с аддитивными технологиями.

**ISBN 978-5-6047339-4-3**

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)  
ББК 34.3

© Коллектив авторов, 2022  
© УдмФИЦ УрО РАН, 2022

**Международная конференция**

структурного упорядочения стало возможным после разработки полуэмпирического потенциала межатомного взаимодействия на основе модели Финнеса-Синклера (Finnis-Sinclair) [3].

В настоящей работе проведено молекулярно-динамическое моделирование микроскопической структуры аморфного сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  при давлениях до 1000 ГПа и температуре 300 К [4]. Результаты показывают, что кристаллизация этой системы происходит только при высоких давлениях через фазовое расслоение и образование двух фракций: жидкой и твердой (рис. 1). Жидкая фаза формируется атомами Nb, в то время как твердая фаза образована атомами Ni. При этом интенсивное формирование и рост устойчивых кристаллических зародышей происходит только при давлениях выше  $p = 200$  ГПа. Взрывная кристаллизация наблюдается при давлениях от 600 до 1000 ГПа. Кинетический фактор скорости кристаллитов Ni быстро увеличивается с давлением, и этот фактор скорости в несколько раз выше, чем фактор скорости роста кристаллов Nb. С одной стороны, эти результаты показывают, что давление является ключевым фактором, контролирующим кристаллизацию аморфного сплава. С другой стороны, из полученных результатов следует, что полезные функциональные свойства объемного аморфного сплава (например, коррозионная стойкость, прочность, твердость, слабая зависимость электросопротивления от температуры), непосредственно связанные с наличием однородной аморфной структуры, могут быть потеряны в экстремальных условиях.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

- [1] Xia L., Li W.H., Fang S.S., Wei B.C., Dong Y.D., Binary Ni-Nb bulk metallic glasses // *J. Appl. Phys.*, 2006. Vol. 99. P. 026103.
- [2] Lesz S., Dercz G., Study on crystallization phenomenon and thermal stability of binary Ni-Nb amorphous alloy // *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2016. Vol. 126. P. 19.
- [3] Zhang Y., Ashcraft R., Mendeleev M.I., Wang C.Z., Kelton K.F., Experimental and molecular dynamics simulation study of structure of liquid and amorphous  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  alloy // *J. Chem. Phys.*, 2016. Vol. 145. P. 204505.
- [4] Galimzyanov B.N., Doronina M.A., Mokshin A.V., Excellent glass former  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  crystallizing under combined shear and ultra-high pressure // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2021. Vol. 572. P. 121102.

**Прямая оценка кинетических факторов кристаллизации аморфных систем**

Д. Т. Яруллин, Б. Н. Галимзянов, А. В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, 420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская 16а.

Кинетические факторы кристаллизации: скорость пристёгивания  $g^+$  частиц к зародышу и скорость отстёгивания  $g^-$  частиц от зародыша, являются одними из

## Международная конференция

наиболее важных кинетических характеристик кристаллизации, поскольку на их основе могут быть определены скорость зародышеобразования  $J$ , скорость роста кристаллической фазы  $\nu$  [1,2]. Кроме того, данные кинетические факторы непосредственно входят в основные кинетические уравнения, определяющие эволюцию функции распределения кристаллических зародышей по размерам [3].

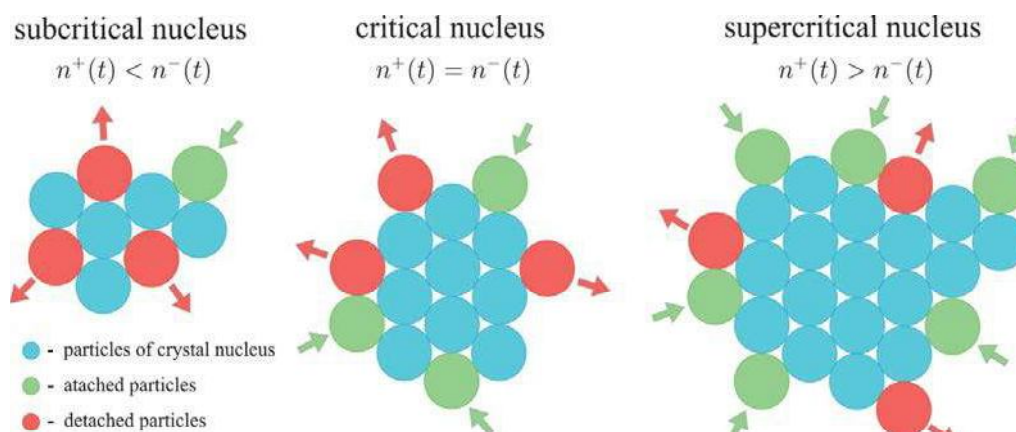


Рисунок 1. Схематическое изображение роста зародыша кристаллической фазы в рамках классической теории нуклеации [4].

В настоящей работе выполнена оценка кинетического фактора  $g^-$  как функции от размера самого крупного зародыша в системе. Оценка производилась на основе данных о количестве отстёгивающихся частиц, получаемых в ходе проведения модифицированного кластерного анализа [5]. Полученные результаты свидетельствуют о том, что фактор  $g^-(N)$  в области сверхкритических размеров увеличивается с увеличением размера «первого» зародыша и следует линейной зависимости  $g^-(N) \propto N$ .

Работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (Проект № 20-1-2-38-3).

- [1] V.A. Shneidman, J. Chem. Phys. **115**, 8141 (2001).  
 [2] M.C. Weinberg, W.H. Poisl, L. Granasy, C. R. Chimie **5**, 765 (2002).  
 [3] J. Rouwhorst, C. Ness, S. Stoyanov, et al., Nat Commun. **11**, 3558 (2020).  
 [4] D. Kashchiev, Nucleation: Basic Theory with Applications (Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000).  
 [5] D.T. Yarullin, B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin, J. Chem Phys. **152**, 224501 (2020).