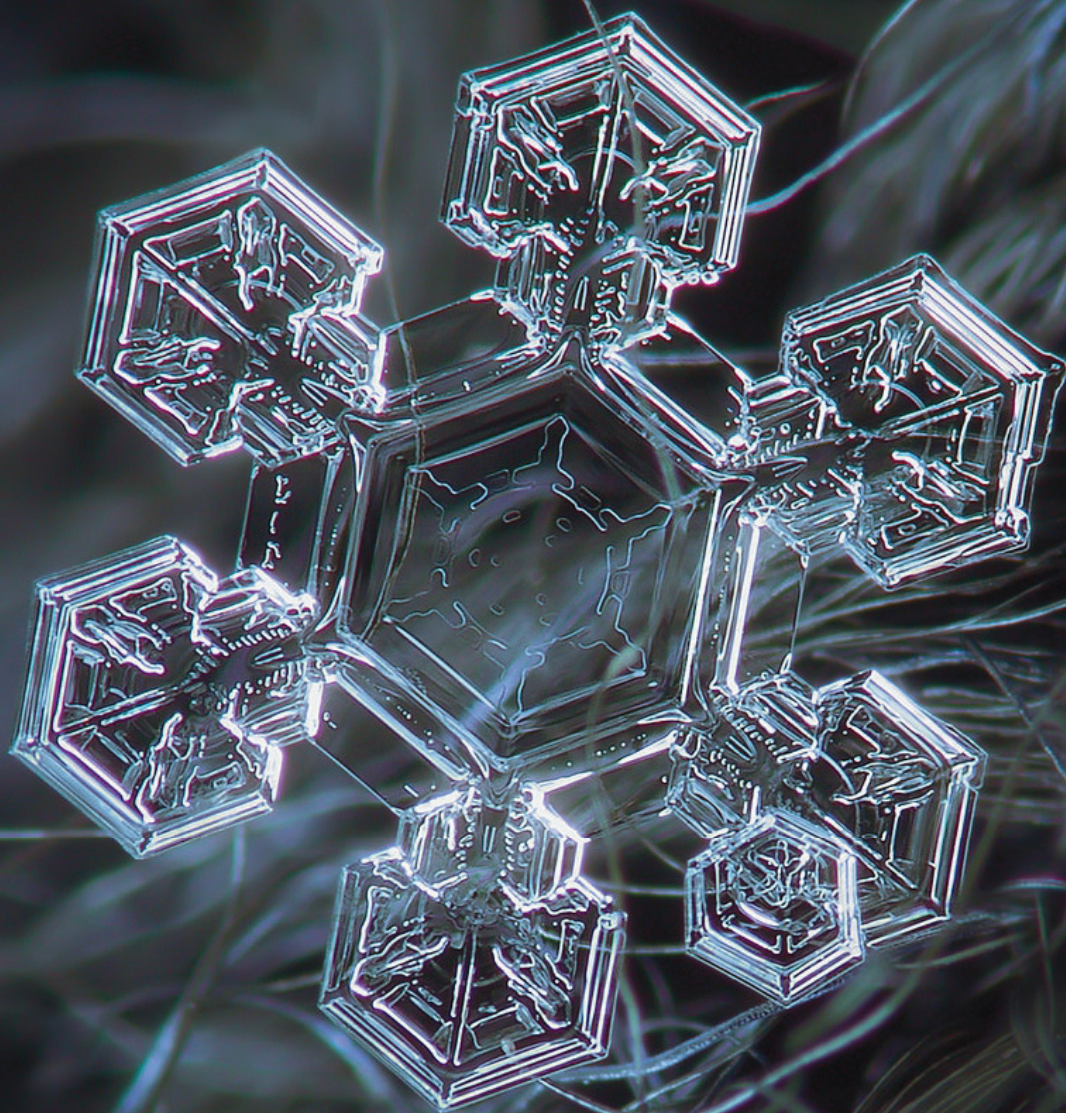


XVII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА–СЕМИНАР  
по проблемам физики  
конденсированного состояния вещества  
(СПФКС – 17)



15 – 22 ноября 2016 года  
Екатеринбург



Российская академия наук  
Уральское отделение Российской академии наук  
Федеральное агентство научных организаций  
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН  
Институт теплофизики УрО РАН  
Институт электрофизики УрО РАН  
Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина



# Тезисы докладов

XVII Всероссийская школа–семинар  
по проблемам физики конденсированного состояния вещества  
(СПФКС–17)

15–22 ноября 2016 года

г. Екатеринбург  
2016

## ХАРАКТЕРИСТИКИ ОБРАЗОВАНИЯ И РОСТА ЗАРОДЫШЕЙ НОВОЙ ФАЗЫ: МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия  
e-mail: [anatolii.mokshin@mail.ru](mailto:anatolii.mokshin@mail.ru)

Образование зародышей новой фазы и их последующий рост представляет собой общий сценарий протекания фазовых переходов первого рода в случае метастабильных систем вне области спинодали. В соответствии с классической теорией нуклеации ожидается, что с увеличением уровня метастабильности пространственный масштаб, характеризующий размер критического зародыша (критический размер), уменьшается: устойчивый рост зародыша становится возможным в случае, когда число структурных единиц (атомов, молекул, частиц), его образующих, достигает значений  $\geq 10$ . При таких условиях применение традиционных экспериментальных методов для исследования начальных этапов фазовых переходов, соотносимых с процессами зародышеобразования и роста, становится затруднительным. Однако, с другой стороны, именно наличие малых характерных пространственных масштабов открывает широкие возможности для использования методов моделирования молекулярной динамики.

В настоящей работе будут представлены методы и подходы, позволяющие в рамках статистического рассмотрения выполнить на основе данных моделирования молекулярной динамики количественный расчет практически всех характеристик процессов зародышеобразования и роста: скорости стационарной и нестационарной нуклеации (зародышеобразования), скорость роста зародышей, скорость фазового перехода, средние времена ожидания зародышей определенного размера, время индукции, размер критического зародыша, свободную поверхностную энергию, фактор Зельдовича, форм-фактор зародыша, а также оценить наиболее вероятный закон роста [1-5].

Работа частично поддержана РФФИ (грант № 14-02-00335-а), а также Грантом Президента РФ (для молодых докторов наук) (грант № МД-5792.2016.2).

1. A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov. *J. Chem. Phys.* **142**, 104502 (2015).
2. A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov. *J. Chem. Phys.* **140**, 024104 (2014).
3. A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, J.-L. Barrat. *Phys. Rev. E*. **87**, 062307 (2013).
4. A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov. *J. Phys. Chem. B* **116**, 11959 (2012).
5. A.V. Mokshin, J.-L. Barrat. *Phys. Rev. E* **82**, 021505 (2010).