

Казанская конференция с международным участием  
Информационные технологии  
2016

Кинетические и термодинамические характеристики  
фазовых переходов первого рода  
на основе моделирования молекулярной динамики

А. В. Мокшин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики

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).