



**XVIII Международная школа-конференция  
"Проблемы физики твердого тела  
и высоких давлений"**

**Идеи и методы  
физики  
конденсированного  
состояния, III**

**Сочи, пансионат "Буревестник"  
18-29 сентября 2019г.**

**ТЕЗИСЫ**



XVIII Школа-конференция молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" продолжает регулярную серию школ, которые проводились Институтом физики высоких давлений РАН каждые два года, начиная с 1989г. С 2015 года Школа-конференция проводится ежегодно совместно с Физическим институтом РАН. В данный сборник входят как тезисы лекций приглашенных лекторов, так и тезисы оригинальных докладов молодых участников.

ISBN 978-5-902622-40-6

© Авторы докладов



# КОНКУРИРУЮЩИЕ МЕХАНИЗМЫ РОСТА И СЛИЯНИЯ КРИСТАЛЛИТОВ В ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ ЖИДКОСТЯХ И СТЕКЛАХ

Галимзянов Б. Н., Мокшин А. В.

Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань  
bulatgnmail@gmail.com

Понимание механизмов слияния зародышей имеет большое значение с точки зрения производства новых функциональных материалов. Одним из самых интригующих является рост кристаллов через механизм ориентированного прикрепления [1, 2]. Этот механизм проявляется в кристаллизующихся переохлажденных жидкостях и обнаруживается экспериментально с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения [3]. Тем не менее, из-за медленной динамики частиц в вязких системах механизм ориентированного присоединения не является определяющим для роста кристаллов [1-3].

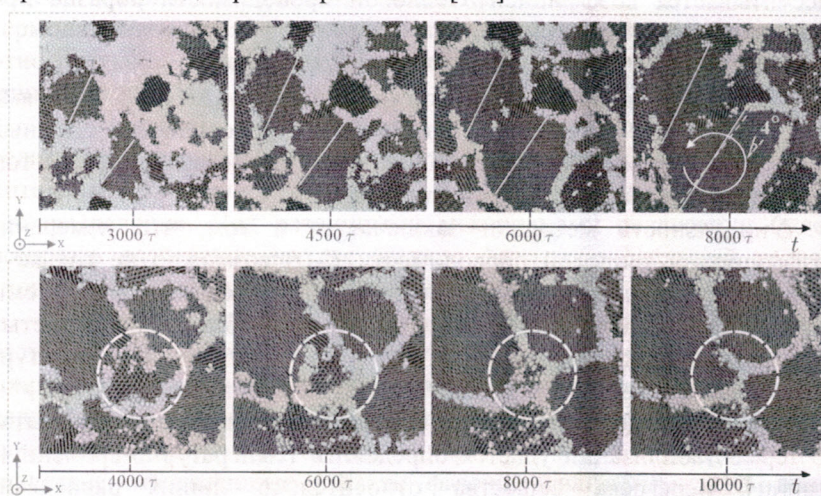


Рисунок 1. (верхние панели) Конфигурации кристаллизующейся системы с малым уровнем переохлаждения ( $\approx 30\%$ ) в различные моменты времени. (нижние панели) Снимки системы в различные моменты времени и при глубоком уровне переохлаждения ( $\approx 65\%$ ).

Настоящая работа посвящена изучению роста кристаллических зародышей в модельной жидкости при различных уровнях



переохлаждения, соответствующих переохлажденному жидкому и аморфному состояниям. Нами выполнено атомистическое моделирование процесса кристаллизации в ультратонкой металлической пленке. Подробная информация о протоколе моделирования приведена в работе [4].

Мы находим, что слияние зародышей происходит по механизму ориентированного присоединения только при низких уровнях переохлаждения системы. В качестве примера на рисунке 1(верхние панели) показан процесс слияния двух кристаллитов развивающийся во времени. Небольшая разница во взаимной кристаллографической ориентации кристаллитов, а также их небольшой размер способствуют процессу коалесценции через этот механизм. Однако вращательное движение этих кристаллитов чрезвычайно медленное, что связано с высокой вязкостью и/или высокой плотностью. В течение периода времени  $4000\tau$  (здесь  $\tau$  – единица времени) угол разориентации уменьшается всего на 4 градуса. Реструктуризация и поглощение мелких кристаллитов является другим механизмом, конкурирующим с механизмом ориентированного присоединения. Этот механизм структурного упорядочения реализуется для системы как при низких, так и при глубоких уровнях переохлаждения. Из рисунка 1(нижние панели) видно, что согласно этому механизму происходит перестройка и поглощение зародыша малого размера.

Таким образом, показано, что рост кристаллов преимущественно происходит за счет процесса их слияния. Мы находим, что слияние кристаллитов реализуется в основном через механизм перестройки/поглощения кристаллических зародышей, тогда как механизм ориентированного присоединения проявляется только при низких уровнях переохлаждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-12-00022).

#### Литература

1. J. Zhang, F. Huang, and Z. Lin, *Nanoscale*, **2**, 18, **2010**
2. V. K. Ivanov, P. P. Fedorov, A. Ye. Baranchikov, V. V. Osiko, *Russ. Chem. Rev.*, **83**, 1204, **2014**
3. M. Niederberger and H. Cölfen, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**, 3271, **2006**
4. B. N. Galimzyanov, D. T. Yarullin, A. V. Mokshin, *Acta Materialia*, **169**, 184, **2019**