

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА ДФИЦ РАН
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Президенты: Агаджанян Р.А., Махачкала, Россия
Калашникова С.Н., Махачкала, Россия
Паскаль С.В., Челябинск, Россия

Секретари: Абсалямова И.С., Махачкала, Россия

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

СБОРНИК ТРУДОВ

международной конференции
15-20 сентября 2019 г., Махачкала

*Конференция проводится при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования РФ*



Махачкала 2019

УДК 537.61

ББК 22.334

Ф-16

Ф-16 Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах. Сборник трудов международной конференции (15-20 сентября 2019 г., Махачкала). – Махачкала: АЛЕФ, 2019. – 458 с.

ISBN 978-5-00128-284-6

В настоящий сборник включены материалы, представленные на международную конференцию "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах".

Конференция проводится Министерством науки и высшего образования РФ, Институтом физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Дагестанским государственным университетом, Челябинским государственным университетом.

Материалы воспроизведены с авторских оригиналов, в связи с чем Оргкомитет конференции не несет ответственности за допущенные опечатки и стилистические погрешности.

ISBN 978-5-00128-284-6

© Институт физики Дагестанского ФИЦ РАН, 2019

© Издательство «АЛЕФ», 2019

Универсальные скейлинговые соотношения в описании температурных зависимостей кинетических характеристик кристаллизации

А.В. Мокшин, Б.Н. Галимзянов

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

Наиболее популярным сценарием протекания процесса кристаллизации переохлажденной жидкости является процесс кристаллического зародышеобразования (нуклеации) и последующий рост кристаллических зерен [1]. В зависимости от того, каким образом было изначально достигнуто переохлаждение и при каких условиях происходит последующая кристаллизация переохлажденной жидкости (или аморфного твердого тела), возможно получение материала, структура которого, а, следовательно, и физико-механические свойства могут быть весьма разнообразными. В связи с этим понимание механизмов инициации кристаллизации как фазового перехода представляется весьма необходимым и важным. Ключевой особенностью кристаллического зародышеобразования является то, что оно происходит, как правило, на нанометровых пространственных масштабах; критический размер кристаллического зародыша при определенных условиях может составлять лишь несколько десятков частиц. Вследствие этого широкие возможности в исследованиях в этой области открываются для методов моделирования молекулярной динамики. Результаты, получаемые с помощью как классического, так и квантово-механического моделирования не только дополняют данные традиционных экспериментов по микроскопии, дифракции, спектроскопии и т.д., но и позволяют выявить совершенно новые закономерности в процессах кристаллического зародышеобразования.

Основной целью настоящей работы являлся расчет температурных зависимостей скоростных характеристик кристаллического зародышеобразования (времени кристаллического зародышеобразования и скорости роста кристаллических зародышей) на основе результатов моделирования молекулярной динамики для таких модельных систем как бинарная леннард-джонсовская жидкость (bLJ) [2] и аморфообразующая многочастичная система Джугутова (Dz) [3], сопоставление с экспериментальными данными и выявление общих закономерностей. Детали моделирования молекулярной динамики модельных систем, процедура получения образцов переохлажденной жидкости, кластерный анализ и методы расчета характеристик кристаллизации представлены в работе [4].

Кристаллизация происходит при температурах ниже температуры плавления T_m , значения которой для разных систем будут являться разными. Кроме того, размер температурной области $(0, T_m]$ зависит от прикладываемого к системе давления. Следуя работе [4], будем фиксировать значения температуры в приведенной температурной шкале \tilde{T} :

$$\tilde{T} = \left(\frac{0.5 - \frac{T_g^2}{T_m^2}}{1 - \frac{T_g}{T_m}} \right) \left[\frac{T}{T_g} \right] + \left(\frac{\frac{T_g}{T_m} - 0.5}{\frac{T_m}{T_g} - 1} \right) \left[\frac{T}{T_g} \right]^2,$$

где T_g - температура стеклования. Определенная таким образом температура задает для произвольной системы температуру стеклования $\tilde{T} = 0.5$ и температуру плавления $\tilde{T}_m = 1$. Для перехода в \tilde{T} -шкалу необходимо знать температуры плавления и стеклования системы.

На рисунке 1 представлены температурные зависимости времен кристаллической нуклеации в температурной шкале \tilde{T} для различных систем. Отметим, что здесь приводятся как результаты, полученные из моделирования молекулярной динамики кристаллизации модельных систем bLJ и Dz, так и экспериментальные данные. Для выполнения сравнения все значения времен нуклеации масштабируются на время нуклеации при температуре стеклования τ_1^g . Как наглядно видно из результатов, представленных на данном рисунке, время кристаллической нуклеации в приведенной температурной шкале подчиняется универсальному степенному:

$$\frac{\tau_1}{\tau_1^g} = \left(\frac{\tilde{T}_g}{\tilde{T}} \right)^\gamma = \left(\frac{1}{2\tilde{T}} \right)^\gamma.$$

(Напомним, что $\tilde{T} = 0.5$). Здесь показатель степени γ соотносится с так называемым индексом хрупкости системы [2] и является фитинговым параметром.

На рисунке 2 представлены температурные зависимости скоростей роста кристаллических зародышей $v_R^{(st)}$ в кристаллизующихся переохлажденных жидкостях и стеклах. По аналогии с предыдущим рисунком, здесь результаты моделирования молекулярной динамики для двух модельных систем bLJ и Dz также сопоставляются с экспериментальными данными. Как видно из рисунка, для температурной области $(0, \tilde{T}_g]$ скорости роста в приведенной температурной шкале также подчиняются универсальной степенной зависимости вида:

$$\frac{v_R^{(st)}}{v_R^{(g)}} = \left(\frac{\tilde{T}_g}{\tilde{T}} \right)^\chi = \left(\frac{1}{2\tilde{T}} \right)^\chi,$$

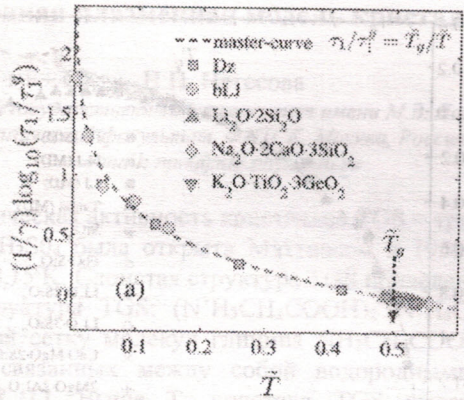


Рис. 2. Универсальная температурная зависимость времени кристаллической нуклеации в переохлажденных жидкостях и стекловых системах.

$v_R^{(g)}$ - скорость роста кристаллического зародыша в системе при температуре стеклования T_g , показатель степени χ также является скейлинговым параметром и соотносится с индексом хрупкости [4]. Примечательной особенностью здесь является наблюдаемое расхождение значений скорости роста от общей универсальной зависимости при температурах $(\tilde{T}_g, \tilde{T}_m)$, которые соответствуют малым и умеренным уровням переохлаждения. Такое поведение объясняется тем, что при данных температурах термодинамические мотивы (межфазная свободная энергия, размер зерна/зародыша, разность химических потенциалов) являются определяющими характер скорости роста как функции температуры [4].

В качестве вывода можно сформулировать следующее. Представленные в работе результаты демонстрируют возможность описания температурных зависимостей скоростных характеристик кристаллического зародышеобразования в кристаллизующихся системах (времени нуклеации, скорости роста) через скейлинговые соотношения: значения времен кристаллической нуклеации и скоростей роста в приведенной температурной шкале удовлетворяют универсальным степенным зависимостям. Результаты могут служить основанием для развития обобщенной теории кристаллизации, а также для определения критериев, характеризующих аморфообразующие свойства систем.

$$\tau_1 = 0.5 \cdot 321.4 \cdot 0.696^{\tilde{T}} = 180.74034803$$

$$\tau_2 = 543.53243762 \cdot 0.5 \cdot \tilde{T}^{\chi} = 533.026508392 = 266.513254295$$

$$\tau_1/\tau_2 = 0.3 \cdot \tilde{T}^{\chi} = 543.53243762 + 266.513254295 = 810.045691915$$

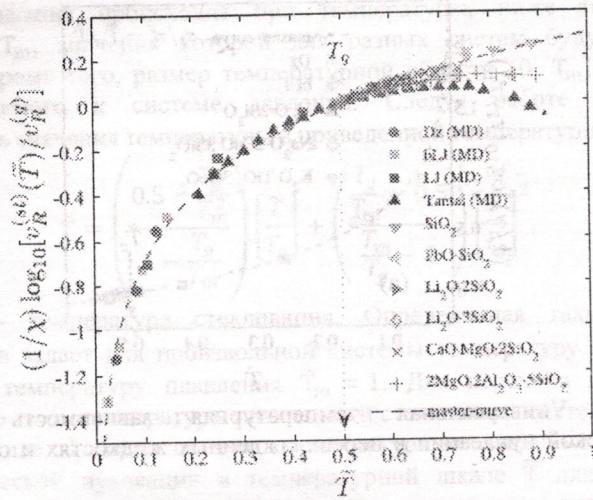


Рисунок 2. Масштабированная скорость роста как функция от приведенной температуры \bar{T} . Полученные результаты для модельных Dz и bLJ-систем сравниваются с результатами моделирования для кристаллизующихся однокомпонентной леннард-джонсовской (LJ) системы и тантала, а также с экспериментальными данными для силикатных стекол.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект 19-12-00022).

- [1] Kashchiev D., Nucleation: Basic Theory with Applications / - Oxford Butterworth-Heinemann, 2000. – 529 p.
- [2] Scaling law for crystal nucleation time in glasses / A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov // J. Chem. Phys. 142, 104502 (2015).
- [3] Formation of a dodecahedral quasicrystalline phase in a simple monatomic liquid / M. Dzugutov // Phys. Rev. Lett. 70, 2924-2927 (1993).
- [4] Kinetics of the Crystalline Nuclei Growth in Glassy Systems / A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov // Physical Chemistry Chemical Physics. 19, 11340-11353 (2017).