



XX

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

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

**Сочи, пансионат "Буревестник"
16-26 сентября 2021г.**

ТЕЗИСЫ

**XX Всероссийская школа-конференция молодых ученых
"Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"**

**Сочи, пансионат "Буревестник"
16 - 26 сентября 2021г.**

ТЕЗИСЫ

Москва, ФИАН 2021

XX 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 978-5-902622-45-1

УДК 538.9(043.2)
ББК В37я431 + В367.1я431

© Коллектив авторов, 2021
© ФИАН, 2021

Всероссийская школа-конференция "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" проводилась Институтом физики высоких давлений РАН (первоначально Школа-семинар) каждые два года, начиная с 1989 г. Все школы-конференции проходили осенью на базе студенческого лагеря Московского Государственного Университета им. М.В. Ломоносова – пансионата «Буревестник».

С течением времени увеличивалось количество участников конференции, расширялась ее тематика, начиная с 2015 года конференция организуется ежегодно силами Института физики высоких давлений РАН и Физического института РАН. С 2018 года соорганизатором конференции является также МГУ им.М.В.Ломоносова. К настоящему времени было проведено девятнадцать таких Конференций, проводимая в 2021 году Конференция будет 20-й в общем ряду школ-конференций «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений».

Целями конференции являются создание условий, способствующих изучению современных достижений в области физики конденсированных сред, в том числе, с применением высоких давлений; содействие развитию научных исследований в области физики конденсированных сред с применением высоких давлений; привлечение как можно большего количества молодых ученых и содействие развитию творческой научной активности молодых ученых. Тематика конференции включает многие научные исследования в рамках инициативных научных проектов, поддержанных различными фондами РФ.

Особенностью Школы-конференции является обязательное устное выступление с оригинальными докладами всех молодых участников. Отобранные тезисы докладов публикуются в данном сборнике.

Презентации лекций и оригинальных докладов будут доступны на сайте XX Конференции <http://school.lpi.ru>

ОРИГИНАЛЬНЫЙ ПОДХОД К ОЦЕНКЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

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

Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань

YarullinDT@gmail.com

Кинетические факторы кристаллизации: скорость пристёгивания частиц g^+ к поверхности зародыша и скорость отстёгивания частиц g^- от поверхности зародыша, являются одними из наиболее фундаментальных величин при описании кинетики зародышеобразования и роста кристаллических структур [1]. Вместе с тем данные величины являются наименее исследованными среди кинетических характеристик кристаллизации. Так, несмотря на огромное количество проведенных экспериментальных и симуляционных исследований, посвященных кинетике кристаллизации переохлажденных жидкостей и стекол, до сих пор не установлено соответствие между размерами кристаллических зародышей и кинетическими факторами кристаллизации. Одной из причин этого является отсутствие методов, позволяющих проводить оценку скорости отстёгивания частиц от поверхности кристаллического зародыша. Также стоит отметить, что скорость пристёгивания ранее оценивалась лишь для зародышей вблизи энергетического барьера зародышеобразования.

В настоящей работе будет представлен оригинальный подход к симуляционной оценке кинетических факторов кристаллизации. Представленный подход может быть применен для зародышей любого размера и позволяет оценить как скорость пристёгивания $g^+(N)$, так и скорость отстёгивания $g^-(N)$ [2].

Апробация подхода проведена на примере кристаллизации переохлажденной системы Леннард-Джонса (LJ). Мы показываем, что в условиях, когда изменение размера кристаллических зародышей обусловлено лишь пристёгиванием/отстёгиванием мономеров, что, как правило, реализуется на начальных этапах кристаллизации, размерная зависимость кинетических факторов кристаллизации описывается баллистической моделью. Кроме того, мы представляем результаты оценки влияния коалесценции на кинетику кристаллизации зародышей при различных уровнях переохлаждения. Так, было обнаружено, что на поздних этапах кристаллизации

влияние коалесценции на кинетические факторы кристаллизации ослабевает. Это свидетельствует о том, что на поздних этапах кристаллизации рост кластеров главным образом происходит в результате пристёгивания мономеров.

Предложенный в настоящей работе подход имеет ряд исключительно важных достоинств, способствующих тому, чтобы данный подход стал незаменимым инструментом при оценке кинетических характеристик кристаллизации.

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

Литература

1. D. Kashchiev, *Nucleation: Basic Theory with Applications* (Butterworth-Heinemann, Oxford, **2000**)
2. D. T. Yarullin, B. N. Galimzyanov, A. V. Mokshin, *The Journal of Chemical Physics*, **152**, 22, 224501, **2020**