

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА ДНЦ РАН  
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

# ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

**СБОРНИК ТРУДОВ**  
международной конференции  
6-9 сентября 2017 г., Махачкала

*Конференция проводится при поддержке  
Федерального агентства научных организаций и  
Российского фонда фундаментальных исследований  
(код проекта 17-02-20415)*

Махачкала 2017

## Характеристики кристаллического зародышеобразования на основе молекулярной динамики

А.В. Мокшин

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики*

Образование зародыщей 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 настоящем докладе 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 грантом Президента РФ (молодые доктора 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).

## Универсальность структурных особенностей и динамических процессов в жидких щелочных металлах

Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин

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

Представлены результаты сравнительного анализа структурных и динамических свойств жидких щелочных металлов ( $Li$ ,  $Na$ ,  $K$ ) вблизи их температур плавления. С помощью масштабных соотношений и экспериментальных данных по дифракции рентгеновских лучей для радиальной функции распределения  $g(r)$  и статического структурного фактора  $S(k)$  показано, что все элементы группы щелочных металлов описываются единой  $r$ - и  $k$ -зависимостями. На основе сравнительного анализа экспериментальных данных по неупругому рассеянию рентгеновских лучей установлено, что особенности микроскопической коллективной динамики для группы щелочных металлов имеют единый характер. Также показано, что закон дисперсии для продольных колебаний  $\omega(k)$  в редуцированной форме характеризуется универсальной  $k$ -зависимостью.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МД-5792.2016.2.

## **Кинетика роста и морфология кристаллических зародышей на начальном этапе неравновесного фазового перехода**

**Б.Н.Галимзянов, А.В.Мокшин**  
*Институт физики К(П)ФУ, Казань, Россия*  
*e-mail: bulatgnmail@gmail.com*

В последнее десятилетие стекольные материалы подвергаются всестороннему изучению и представляют большой интерес как с научной, так и с практической точки зрения [1-3]. Благодаря неупорядоченной структуре и метастабильной природе, стекольные материалы обладают необычными механическими и физическими свойствами, что позволяет найти им широкое применение в производстве наноструктурных материалов, например, для фотоники, медицины, электроники. С фундаментальной точки зрения, особый интерес представляет исследование микроскопической структуры неупорядоченных систем при внешних воздействиях, в частности, при устойчивом сдвиге [1-4]. Исследования в данной области являются весьма перспективными с точки зрения практического применения; понимание поведения микроскопической структуры при воздействии устойчивым сдвигом позволит управлять фазовыми переходами и получать материалы с заданными реологическими свойствами.

Влияние устойчивого однородного сдвига на морфологию кристаллических структур, формирующихся в аморфных системах является малоизученным в случае глубоких переохлаждений [3,4]. Так, например, отсутствует понимание микроскопических механизмов, определяющих несферичность формы кристаллических зародышей, формирующихся на начальном этапе кристаллизации, когда их размер сравним с критическим размером [4]. Здесь возникает необходимость в оценке поведения морфологических характеристик, определяющих размер и форму зародышей критического размера, а также их ориентацию в пространстве при различных скоростях сдвига и термодинамических условиях. Понимание особенностей поведения этих характеристик дает возможность влиять на кинетику нуклеации и процесс роста кристаллических структур, а также получать кристаллиты с заданными размерами и формами.

В настоящей работе мы рассмотрели микроскопические механизмы кристаллизации однокомпонентной стекольной системы через моделирование методом неравновесной молекулярной динамики. Частицы взаимодействовали через короткодействующий осциллирующий потенциал Джуготова, позволяющий генерировать стабильное аморфное состояние [5].

При реализации однородного сдвига был использован Slod-алгоритм, где сдвиговая скорость добавляется к  $x$ -компоненте собственной (тепловой) скорости движения каждой частицы системы. В настоящей работе мы применяем однородный сдвиг с различными скоростями: 0.0001, 0.0005, 0.001, 0.002, 0.005, 0.008, и  $0.01 \tau^{-1}$ . Рассматриваемая система является трехмерной, состоящей из 6912 идентичных сферических частиц, которые располагаются внутри кубической ячейки моделирования. Скорости и координаты частиц определяются через интегрирование уравнений движения алгоритмом Верле с временным шагом  $0.005 \tau$ . В работе используются стандартные лэннард-джонсовские единицы измерения физических величин. Стекольные образцы были приготовлены через быстрое охлаждение жидкости до температур 0.05, 0.15, и  $0.5 \varepsilon/k_B$ . Для обнаружения кристаллической структуры был применен кластерный анализ, основанный на расчете параметров ориентационного порядка [6].

Для количественной характеристики ориентационной симметрии зародышей кристаллической фазы мы оцениваем несферичность их формы через параметр [7]

$$S_0 = \frac{(I_{xx} - I_{yy})^2 + (I_{xx} - I_{zz})^2 + (I_{yy} - I_{zz})^2}{2(I_{xx} + I_{yy} + I_{zz})^2}, \quad (1)$$

где момент инерции

$$I_{\alpha\beta} = m \sum_{i=1}^{n_c} (\vec{r}_i^2 \delta_{\alpha\beta} - \vec{r}_{i\alpha} \vec{r}_{i\beta}). \quad (2)$$

Здесь  $\vec{r}_i$  - есть расстояние между центром масс зародыша критического размера и  $i$ -ой частицей. Параметр  $S_0$  равен нулю в случае идеальной сферической формы; в случае выраженной несферичности формы  $S_0 > 0$ .

Результаты кластерного анализа обнаруживают, что неравновесный фазовый переход в стекольной системе происходит через образование локализованных кристаллических зародышей малых размеров, преимущественно состоящих из 30-50 частиц. Кроме того, значение параметра порядка  $Q_6$  увеличивается и выходит на насыщение, принимая значение 0.47, что указывает на полностью упорядоченную кристаллическую систему. Отметим, что такое поведение параметра порядка является типичным для процессов активационного типа, при котором кристаллизация системы происходит через механизм зародышеобразования. Похожее поведение параметра  $Q_6$  наблюдается при

других рассматриваемых скоростях сдвига и температурах, где различие имеется только во временных масштабах.

Из анализа временной эволюции размера самого крупного кристаллического зародыша при различных температурах и скоростях сдвига нами оценены критический размер  $n_c$  и параметр несферичности  $S_0$ . Результаты обнаруживают увеличение критического размера от 88 до 130 частиц с увеличением скорости сдвига и температуры. Увеличение критического размера с температурой обусловлено увеличением способности частиц к локальным перегруппировкам и скорости их пристегивания к поверхности кристаллических зародышей. Как правило, на начальном этапе кристаллизации стекольной системы кристаллические зародыши характеризуются сравнительно малыми размерами и большой кривизной поверхности. Мы рассчитали среднее значение параметра несферичности  $S_0$ , значение которого увеличивается от 0.005 до 0.045 с увеличением скорости сдвига, что также указывает на увеличение несферичности формы зародышей критического размера. В статистической трактовке зародыши критического размера, формирующиеся как при отсутствии сдвига, так и при малых деформациях, характеризуются формой, близкой к сферической. Параметр несферичности для этих зародышей принимает малые значения  $S_0 < 0.02$ . При больших деформациях форма зародышей искажается, для которых  $S_0 > 0.02$ . При этом искажение формы зародыша происходит в некотором выделенном направлении, которое меняется в зависимости от скорости сдвига (см. рисунок 1).

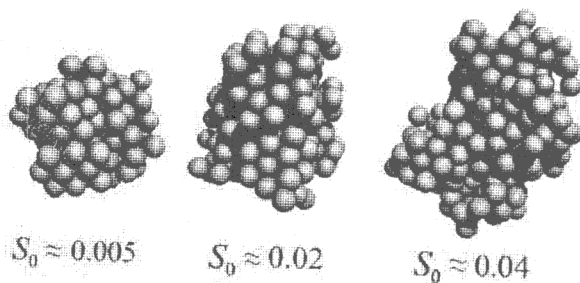


Рис. 1 Мгновенные снимки конфигурации кристаллических зародышей критического размера

Из рисунка 1 видно, что с ростом деформации визуально достаточно хорошо проявляются изменения в форме зародышей. Таким образом, при

кристаллизации стекольной системы под действием однородного сдвига происходит формирование деформированных зародышей, что обуславливает увеличение значения параметра  $S_0$ .

*Работа поддержана грантом для молодых ученых Российской Федерации: MD-5792.2016.2.*

- [1] H. Janeschitz-Kriegl, J. Rheol. **57**, 1057 (2013).
- [2] L.A. Greer, Science 267, **1947** 1953 (1995).
- [3] A.V. Mokshin, J.-L. Barrat, Phys. Rev. E **82**, 021505 (2010).
- [4] A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov and J.-L. Barrat, Phys. Rev. E **87**, 062307 (2013).
- [5] M. Dzugutov, Phys. Rev. A **46**, R2984 (1992).
- [6] P.J. Steinhardt, D.R. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).
- [7] A. Reinhardt, J.P.K. Doye, J. Chem. Phys. **136**, 054501 (2012).