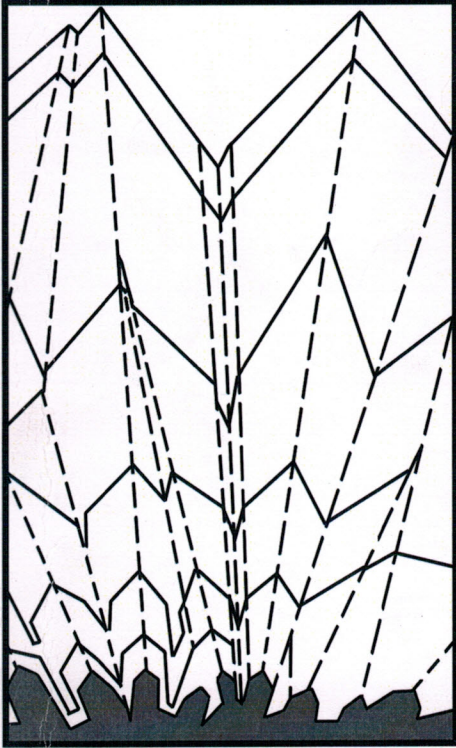




Solidification

computer simulation,
experiments and technology



Abstracts of 8th international conference
Izhevsk, 11–12 April, 2019

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)

ББК 34.3

Главный редактор П. К. Галенко
Ответственный редактор Л. В. Камаева

К26 Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии: Тезисы VIII Международной конференции. – Ижевск: Изд-во УдмФИЦ УрО РАН, 2019. – 240 с.

Solidification: computer simulation, experiments and technology: Abstracts of the VIII internationale conference. – Izhevsk: UdmFRC UB RAS Publ., 2019. – 240 p.

ISBN 978-5-6042700-0-4

Настоящий сборник содержит тезисы докладов участников VIII международной конференции «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС-2019, 11–12 апреля 2019 года, УдГУ), посвященной актуальным проблемам теории, эксперимента и разработки компьютерных технологий процессов макро- и микроскопической кристаллизации.

Рассмотрены процессы структурообразования в сплавах, процессы высокоскоростной кристаллизации, современные проблемы в областях атомистической динамики, аморфных систем, старения сплавов и процессов в твердой кристаллической фазе, также связанные с аддитивными технологиями.

ISBN 978-5-6042700-0-4

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)

ББК 34.3

© Коллектив авторов, 2019
© УдмФИЦ УрО РАН, 2019

определявшимися скоростями движения погруженного нагревателя. Использовалось бегущее магнитное поле с частотой 50 Гц и индукцией 0-10 мТл, рассмотрены оба направления движения поля. Расчеты показали существенное уменьшение прогиба фронта в методе ОТФ по сравнению с методом Бриджмена в сходной постановке. Найдено, что магнитные поля с индукцией порядка 10 мТл генерируют течение с интенсивностью, превышающей интенсивность течения, вызванного гравитационно-концентрационными механизмами.

- [1] Golyshev V.D., Gonik M.A. A temperature field investigation in case of crystal growth from the melt with a plane interface on exact determination thermal conditions // *Crys. Prop. Prep.* 1991. Vol. 36-38. p.623.
- [2] Ostrogorsky A.G. Single-crystal growth by the submerged heater method // *Meas. Sci. Technol.* 1990. Vol. 1, N. 5. P. 463–464.
- [3] Lyubimov D.V., Lyubimova T.P., Roux B. Mechanisms of vibrational control of heat transfer in a liquid bridge. // *Int. J. Heat Mass Trans.* 1997. Vol. 40, N. 17. P. 4031–4042.
- [4] Paetzold O. et al. The use of magnetic fields in vertical Bridgman/Gradient Freeze-type crystal growth. // *Eur. Phys. J. Special Topics.* 2013. Vol. 220. P. 243–257.
- [5] Dold P., Benz K. Rotating magnetic fields: Fluid flow and crystal growth applications. // *Prog. Cryst. Growth Ch.* 1999. Vol. 38, N. 1–4. P. 39–58.
- [6] Mazuruk K. Control of melt convection using travelling magnetic fields // *Adv. Space Res.* 2002. Vol. 29, N. 4. P. 541–548.
- [7] Volz M., Mazuruk K. Lorenz body force induced by travelling magnetic fields // *Magneto hydrodynamics.* 2004. Vol.40. N. 2. P. 117–126.
- [8] Nouri A., Delannoy Y., Zaidat K. Influence of traveling magnetic field on the crystallization of multicrystalline silicon / *Proc. Of Int. Conf. Crystalline Silicon for Solar Cells (CSSC5)*, Taipei, Taiwan, 2010.

Влияние уровня переохлаждения металлического расплава на морфологию формирующихся кристаллических зародышей

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

Казанский федеральный университет, 420008 Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18

Проводимые в последние десятилетия интенсивные исследования переохлажденных жидкостей и стекол внесли определенную ясность в понимание микроскопической структуры и протекающих в ней процессов фазовых трансформаций, как правило, связанных с кристаллизацией [1, 2]. Однако протекание кристаллизации при глубоких переохлаждениях, а также

влияние уровня переохлаждения на морфологию формирующихся кристаллитов, всё ещё плохо изучены. Настоящая работа направлена на изучение влияния глубины переохлаждения на морфологию кристаллических зародышей с помощью моделирования атомарной динамики в однокомпонентном металлическом расплаве [3]. Структурный и кластерный анализ конфигурационных данных, получаемых из моделирования, выполняется через расчет параметров локального ориентационного порядка [4]. Значения нуклеационных характеристик, таких как критический размер и время нуклеации, оцениваются модифицированным методом среднего времени первого появления зародыша [5].

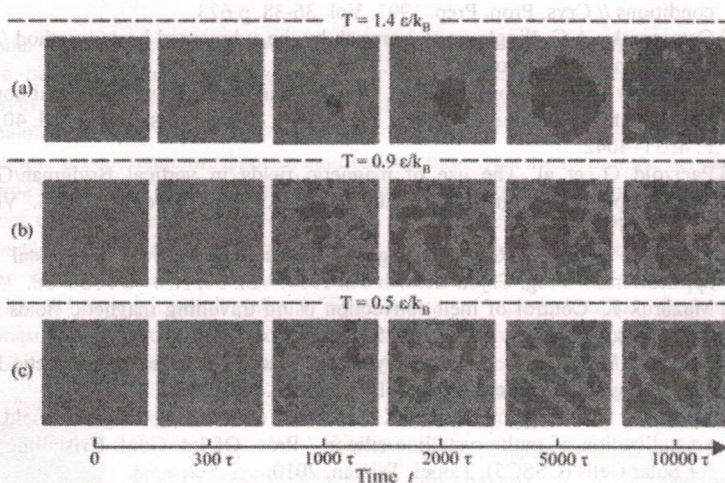


Рисунок 1. Мгновенные снимки конфигурации системы, полученные в различные моменты времени при различных температурах. Серый цвет – частицы неупорядоченной фазы. Черный цвет – частицы кристаллической фазы.

На рисунке 1 изображены мгновенные снимки конфигурации системы, полученные при различных температурах. Температура $1.4 \epsilon/k_B$ соответствует малому уровню переохлаждения, а температура $0.5 \epsilon/k_B$ глубокому переохлаждению, где ϵ - единица энергии, k_B - постоянная Больцмана. Из рисунка 1 видно, что при малых уровнях переохлаждения кристаллические зародыши имеют более округлую форму. При этом в системе, как правило, формирует один «жизнеспособный» зародыш, который в процессе роста формирует монокристалл. Данный сценарий кристаллизации хорошо предсказывается в рамках классической теории нуклеации [1, 6]. С другой стороны, при умеренных и глубоких уровнях переохлаждения наблюдается рост

количества кристаллических зародышей малых размеров. Рост этих зародышей сопровождается их слиянием, что приводит к формированию поликристаллической структуры с разветвленной формой. Следует отметить, что на этапе нуклеации кристаллические зародыши, формирующиеся как при малых, так и при глубоких уровнях переохлаждения, не обладают сильно выраженной несферичностью формы. Разветвленные структуры, которые при глубоких переохлаждениях системы создают видимость наличия спинодального расслоения, формируются на этапе роста и коалесценции зародышей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Казанского федерального университета и грантов РФФИ № 18-02-00407 и № 18-32-00021.

- [1] Kelton K.F., Greer A.L. Nucleation in Condensed Matter: Application in Materials and Biology (Elsevier, Amsterdam, 2010).
- [2] Ediger M.D., Harrowell P. Perspective: Supercooled liquids and glasses // J. Chem. Phys., 2012. Vol. 137. P. 080901.
- [3] Galimzyanov B.N., Yarullin D.T., Mokshin A.V. Change in the Crystallization Features of Supercooled Liquid Metal with an Increase in the Supercooling Level // JETP Letters, 2018. Vol. 107. P. 629-634.
- [4] Steinhardt P.J., Nelson D.R., Ronchetti M. Bond-orientational order in liquids and glasses // Phys. Rev. B, 1983. Vol. 28. P. 784-805.
- [5] Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. Steady-State Homogeneous Nucleation and Growth of Water Droplets: Extended Numerical Treatment // J. Phys. Chem. B, 2012. Vol. 116. P. 11959-11967.
- [6] Sosso G.C., Chen J., Cox S.J., Fitzner M., Pedevilla P., Zen A., Michaelides A. Crystal Nucleation in Liquids: Open Questions and Future Challenges in Molecular Dynamics Simulations // Chem. Rev., 2016. Vol. 116. P. 7078-7116.

Влияние структуры расплава на зарождение и рост квазикристаллической фазы в сплавах Al-Cu-Fe

Л. В. Камаева^{1,2}, И. В. Стерхова¹, В. И. Ладьянов¹, Р. Е. Рыльцев^{2,3},
Н. М. Щелкачев²

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Научный центр металлургической физики и материаловедения, 426001 Россия, г. Ижевск, ул. Барышникова, 53

²Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, 142432 Россия, г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, 1-А

³Институт металлургии УрО РАН, 620016 Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101