

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное учреждение «Российская академия наук»
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана
(национальный исследовательский университет)»
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук»
Акционерное общество «Центр прикладной физики МГТУ им. Н.Э. Баумана»

НЕОБРАТИМЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПРИРОДЕ И ТЕХНИКЕ

ДВЕНАДЦАТАЯ ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

Москва, 31 января — 3 февраля 2023 года

Труды конференции

Том 1



Москва
ИЗДАТЕЛЬСТВО
МГТУ им. Н.Э. Баумана
2023

УДК 536.75
ББК 22.317
Н52

Издание доступно в электронном виде по адресу
<https://bmstu.press/catalog/item/7871/>

Н52 **Необратимые процессы в природе и технике** : Двенадцатая Всероссийская конференция (Москва, 31 января — 3 февраля 2023 года) : труды конференции : в 2 т. / Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Российская академия наук», Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана (национальный исследовательский университет)», Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Физический институт имени П. Н. Лебедева Российской академии наук», Акционерное общество «Центр прикладной физики МГТУ им. Н. Э. Баумана». — Москва : Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2023.

ISBN 978-5-7038-6011-3

Т. 1. — 542, [1] с. : ил.

ISBN 978-5-7038-6012-0

В трудах Двенадцатой Всероссийской конференции приведены результаты, полученные авторами в области исследования необратимых процессов в природе и технике. В первый том вошли материалы первой и второй секций. Работы первой секции посвящены перспективным направлениям исследования необратимых физических процессов. В работах второй секции рассматривается математическое моделирование физических процессов и технических систем.

Труды конференции предназначены для студентов, аспирантов и научных работников.

УДК 536.75
ББК 22.317

Издается в авторской редакции.

ISBN 978-5-7038-6012-0 (Т. 1)

ISBN 978-5-7038-6011-3

© МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2023

© Оформление. Издательство

МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2023

УДК 539.8

Количественная характеристика кинетики процессов, противодействующих кристаллизации в аморфных системах

Галимзянов Булат Наилевич

bulatgnmail@gmail.com

Казанский федеральный университет

Обсуждаются существующие теоретические и численные методы расчета кинетических факторов, противодействующих кристаллизации. Впервые рассчитана зависимость скорости отрыва атомов от размера зародыша на примере кристаллизующейся аморфной системы Леннарда — Джонсона при различных уровнях переохлаждения. Эти расчеты проводились для широкого диапазона размеров кристаллических зародышей. Полученные результаты выявили чередование различных сценариев роста кристаллов, которые коррелируют с кинетически ограниченным и линейным сценариями роста.

Ключевые слова: фазовые переходы, кристаллизация, аморфные системы, молекулярная динамика

Кристаллизация переохлажденных жидкостей напрямую зависит от кинетических и термодинамических факторов. Термодинамические факторы включают межфазную свободную энергию, а также разницу химических потенциалов между двумя разными фазами, которая является движущей силой зарождения кристаллов в термодинамической интерпретации. Кинетические факторы — это, прежде всего, скоростные параметры, характеризующие частоту «переходов» атомов из одной фазы в другую [1, 2].

В настоящей работе впервые подробно рассмотрен процесс, противодействующий кристаллизации [2]. Были представлены различные методы оценки скорости отрыва атомов g^- в зависимости от размера кристаллического зародыша N : метод прямого расчета по результатам моделирования; метод, основанный на известной скорости роста зародыша и скорости присоединения атомов g^+ . На примере гомогенного зарождения кристаллов в переохлажденной модельной жидкости показано, что эти методы позволяют корректно рассчитывать зависимость кинетического фактора g^- от размера зародыша N для широкого диапазона размеров: от стадии зарождения устойчивых кристаллитов до конечной стадии кристаллизации системы (см. рисунок). Отметим, что такие результаты ранее не публиковались в научной литературе.

Результаты теоретических расчетов показали, что N -зависимость скорости отрыва не воспроизводится никаким общим уравнением из-за чередования различных сценариев роста кристаллов. Сценарий кинетически ограниченного роста с законом $\sim N^{2/3}$ реализуется на стадии образования зародышей критических размеров. Следующий сценарий наблюдается, когда скорость отрыва линейно возрастает с увеличением размера зародыша на стадии стабильного роста зародышей. Такой сценарий вполне ожидаем в случае глубокого переохлаждения из-за неравномерного роста кристаллических зародышей [3, 4]. На стадии коалесценции наблюдается переход к сценарию, близкому к кинетически ограниченному росту, за счет перестройки кристаллической структуры и сращивания зародышей. В этом случае процессы отрыва и присоединения атомов становятся равновероятными во всех направлениях. Важно отметить, что кинетические факторы g^+ и g^- показывают одну и ту же N -зависимость независимо от переохлаждения системы.

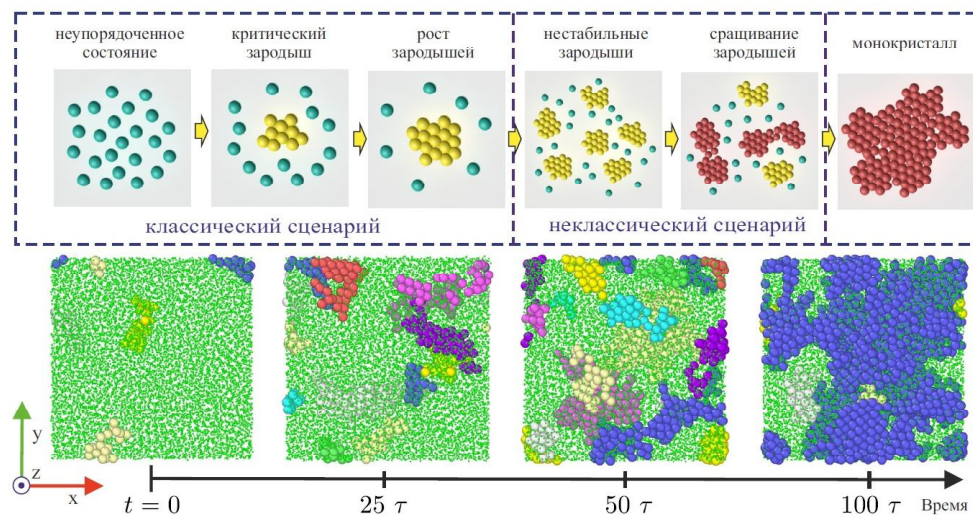


Рис. Мгновенные снимки системы в различные моменты времени и при различных стадиях роста кристаллических зародышей

Такая корреляция позволяет получить более точное решение кинетических уравнений применительно к случаю кристаллизации систем с более сложным межатомным взаимодействием, например, при объемной и/или поверхностной кристаллизации молекулярных стекол, кристаллизации тонких аморфных пленки и пористые аморфные сплавы.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ (проект № 19-12-00022-П).

Литература

- [1] Brazhkin V.V. Kinetic Model of Softening of Glasses. JETP Lett, 2020, vol. 112, pp. 745–751. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0021364020230058>
- [2] Andrianov R.A., Androsch R., Zhang R. Growth and dissolution of crystal nuclei in poly(l-lactic acid) (PLLA) in Tammann's development method. Polymer, 2020, vol. 196, art. 122453. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2020.122453>
- [3] Galimzyanov B.N., Yarullin D.T., Mokshin A.V. Kinetics of inherent processes counteracting crystallization in supercooled monatomic liquid. Journal of Physics Condensed Matter, 2022, vol. 34, art. 454002. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ac8fd1>
- [4] Slezov V.V. Kinetics of First-order Phase Transitions. Wiley-VCH, Weinheim, 2009, 415 p.