

Тезисы докладов
международной конференции

ФИЗИКА.СПб

19–23 октября 2020 года

Санкт-Петербург
2020

ББК 22.3:22.6

Ф48

ФизикА.СПб: тезисы докладов международной конференции 19–23 октября 2020 г.
— СПб: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2020

Организатор

ФТИ им. А. Ф. Иоффе

При поддержке

ООО «ИННО-МИР»

Российского фонда фундаментальных исследований
(проект № 20-02-22042)

Программный комитет

Аверкиев Никита Сергеевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) — председатель

Соколовский Григорий Семенович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) — заместитель председателя

Арсеев Петр Иварович (ФИАН)

Варшалович Дмитрий Александрович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Воробьев Леонид Евгеньевич (СПбПУ)

Гавриленко Владимир Изяславович (ИФМ)

Дьяконов Михаил Игоревич (Université Montpellier II, France)

Иванчик Александр Владимирович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Калашникова Александра Михайловна (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Карачинский Леонид Яковлевич (ООО «Коннектор Оптикс»)

Конников Семен Григорьевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Кучинский Владимир Ильич (СПбГЭТУ, ФТИ им. Иоффе)

Новожилов Виктор Юрьевич (СПбГУ)

Пихтин Никита Александрович (ООО «Эльфоллом», ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Рудь Василий Юрьевич (СПбПУ)

Степина Наталья Петровна (ИФП им. А. В. Ржанова)

Сурис Роберт Арнольдович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Нестоклон Михаил Олегович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Устинов Виктор Михайлович (НТЦ микроэлектроники РАН)

Организационный комитет

Соколовский Григорий Семенович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) — председатель

Поняев Сергей Александрович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) — зам. председателя

Азбель Александр Юльевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Дюделев Владислав Викторович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Когновицкая Елена Андреевна (ВНИИМ им. Д.И. Менделеева)

Лосев Сергей Николаевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Петров Павел Вячеславович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Рябочкина Полина Анатольевна (МГУ им. Н. П. Огарёва)

Серин Артем Александрович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Черотченко Евгения Дмитриевна (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Международная конференция 2020 года продолжает традицию Итоговых семинаров по физике и астрономии по результатам конкурсов грантов для молодых ученых, проводившихся в Санкт-Петербурге с середины 90-х.

ISBN 978-5-7422-7050-8

© Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого, 2020

Точная оценка кинетического скоростного фактора кристаллизации переохлажденных жидкостей

Яруллин Д. Т.¹, Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

¹КФУ

e-mail: YarullinDT@gmail.com

Одной из наиболее фундаментальных величин в теории зародышеобразования является кинетический фактор кристаллизации g^+ . Корректная оценка значения этой величины необходима для определения скорости зародышеобразования и скорости роста кристаллических зародышей в системе, претерпевающей структурно-фазовые трансформации [1, 2]. Вместе с тем, для оценки значения величины g^+ необходимо иметь возможность отслеживать динамику отдельных атомов на пикосекундных временных масштабах, что крайне сложно осуществить экспериментальными методами. В настоящее время, решение данной задачи является возможным только при использовании методов моделирования атомарной/молекулярной динамики.

В настоящей работе исследуется процесс кристаллизации переохлажденной системы Леннарда-Джонса, состоящей из 13500 частиц. Уровень переохлаждения системы составляет 40%. Идентификация частиц, участвующих в формировании упорядоченных структур, производится через кластерный анализ, основанный на расчете параметров локального ориентационного порядка и на условии тен-Волде [3]. Точная оценка кинетического скоростного фактора g^+ производится с помощью развитого нами оригинального алгоритма идентификации частиц, локально-перестраивающихся вблизи кристаллического зародыша. Полученные результаты сопоставляются с доступными данными моделирования, полученными для кристаллизующегося переохлажденного Ni и для переохлажденного сплава NiAl [4]. Было обнаружено, что для зародышей сверхкритического размера зависимость величины g^+ от размера зародыша следует по степенному закону с показателем степени 0.9. Этот результат указывает на смешивание различных режимов роста кристаллических зародышей в рассматриваемых системах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта No. 19-12-00022.

Список литературы

1. D. Kashchiev, Nucleation: Basic Theory with Applications (Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000);
2. B. N. Galimzyanov, D. T. Yarullin, A. V. Mokshin, Acta Materialia 169, 184-192, 2019;
3. ten Wolde P.R., Ruiz-Montero M. J., Frenkel D, Phys. Rev. Lett. 75, 2714, 1995;
4. H. Song, Y. Sun, F. Zhang, C. Z. Wang, K. M. Ho, and M. I. Mendelev, Phys. Rev. Materials 2, 023401, 2018.