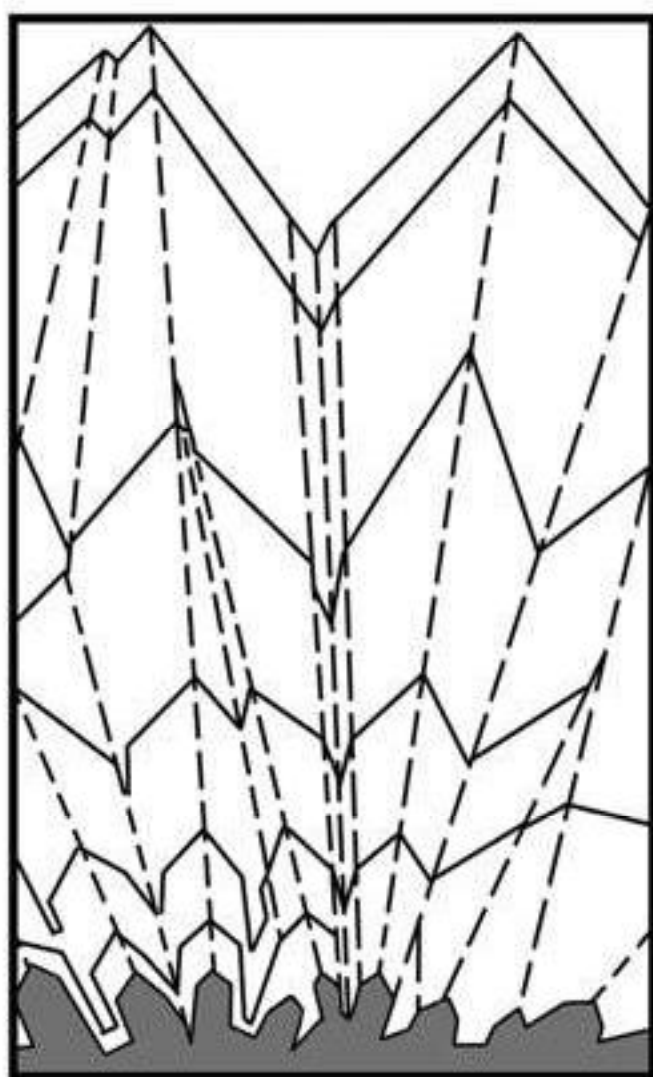




Solidification

computer simulation,
experiments and technology



Abstracts of 9th international conference
Izhevsk, 6–9 April, 2022

Министерство науки и высшего образования РФ
ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет»
ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН»
АО Научно-производственное объединение «МКМ»

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ: КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ, ЭКСПЕРИМЕНТ, ТЕХНОЛОГИИ

Тезисы
IX Международной конференции
6–9 апреля 2022 года

УдмФИЦ УрО РАН

Ижевск
2022

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 IX Международной конференции. – Ижевск: Изд-во УдмФИЦ УрО РАН, 2022. – 258 с.

Solidification: computer simulation, experiments and technology: Abstracts of the IX internationale conference. – Izhevsk: UdmFRC UB RAS Publ., 2022. – 258 p.

ISBN 978-5-6047339-4-3

Настоящий сборник содержит тезисы докладов участников IX международной конференции «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС-2022, 6–9 апреля 2022 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, образования микроструктур и старения сплавов, а также связанные с аддитивными технологиями.

ISBN 978-5-6047339-4-3

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)
ББК 34.3

© Коллектив авторов, 2022
© УдмФИЦ УрО РАН, 2022

Международная конференция

анализа, основанный на вращательных инвариантах, не позволяет достаточно корректно идентифицировать искаженный икосаэдрический ближний порядок в металлических расплавах.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета. Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект №22-22-00508).

Рост кристаллов в сплаве $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ при сверхвысоких давлениях

Б. Н. Галимзянов, М. А. Доронина, А. В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, 420008 Россия, г. Казань, ул. Кремлевская 16а

Среди бинарных объемных металлических стекол наилучшей аморфообразующей способностью обладает система Ni-Nb состава $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ [1]. Образцы этого сплава практически не кристаллизуются при нормальных условиях, если их линейный размер меньше 2 мм. Эта особенность отличает $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ от других бинарных аморфных сплавов на основе Ni. Механизмы микроскопической структурной трансформации в аморфном сплаве $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ изучены слабо из-за трудностей, связанных с контролем зарождения и роста наноразмерных кристаллитов внутри объемного образца [2]. Начальную стадию кристаллизации трудно отследить по данным рентгеновской и нейтронной спектроскопии, так как эти методы, как правило, дают усредненную информацию о структуре.

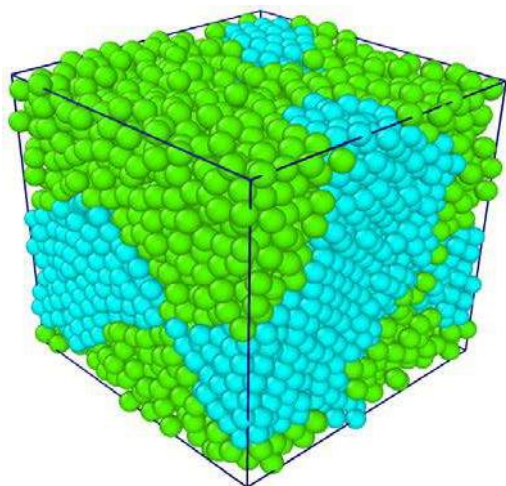


Рисунок 1.

Мгновенный снимок системы при давлении 800 ГПа, состоящей из двух фракций: жидкой (зеленые шары), состоящей из атомов Nb, и твердой (синие шары), сформированной атомами Ni.

До недавнего времени детальное молекулярно-динамическое моделирование процесса кристаллизации в аморфном сплаве $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ не проводилось из-за отсутствия потенциалов межчастичного взаимодействия, способных корректно воспроизводить аморфную структуру и физические свойства этой системы для широкого диапазона температур и давлений. Лучшее понимание механизмов

Международная конференция

структурного упорядочения стало возможным после разработки полуэмпирического потенциала межатомного взаимодействия на основе модели Финнеса-Синклера (Finnis-Sinclair) [3].

В настоящей работе проведено молекулярно-динамическое моделирование микроскопической структуры аморфного сплава $Ni_{62}Nb_{38}$ при давлениях до 1000 ГПа и температуре 300 К [4]. Результаты показывают, что кристаллизация этой системы происходит только при высоких давлениях через фазовое расслоение и образование двух фракций: жидкой и твердой (рис. 1). Жидкая фаза формируется атомами Nb, в то время как твердая фаза образована атомами Ni. При этом интенсивное формирование и рост устойчивых кристаллических зародышей происходит только при давлениях выше $p = 200$ ГПа. Взрывная кристаллизация наблюдается при давлениях от 600 до 1000 ГПа. Кинетический фактор скорости кристаллитов Ni быстро увеличивается с давлением, и этот фактор скорости в несколько раз выше, чем фактор скорости роста кристаллов Nb. С одной стороны, эти результаты показывают, что давление является ключевым фактором, контролирующим кристаллизацию аморфного сплава. С другой стороны, из полученных результатов следует, что полезные функциональные свойства объемного аморфного сплава (например, коррозионная стойкость, прочность, твердость, слабая зависимость электросопротивления от температуры), непосредственно связанные с наличием однородной аморфной структуры, могут быть потеряны в экстремальных условиях.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

- [1] Xia L., Li W.H., Fang S.S., Wei B.C., Dong Y.D., Binary Ni-Nb bulk metallic glasses // *J. Appl. Phys.*, 2006. Vol. 99. P. 026103.
- [2] Lesz S., Dercz G., Study on crystallization phenomenon and thermal stability of binary Ni-Nb amorphous alloy // *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2016. Vol. 126. P. 19.
- [3] Zhang Y., Ashcraft R., Mendeleev M.I., Wang C.Z., Kelton K.F., Experimental and molecular dynamics simulation study of structure of liquid and amorphous $Ni_{62}Nb_{38}$ alloy // *J. Chem. Phys.*, 2016. Vol. 145. P. 204505.
- [4] Galimzyanov B.N., Doronina M.A., Mokshin A.V., Excellent glass former $Ni_{62}Nb_{38}$ crystallizing under combined shear and ultra-high pressure // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2021. Vol. 572. P. 121102.

Прямая оценка кинетических факторов кристаллизации аморфных систем

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

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, 420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская 16а.

Кинетические факторы кристаллизации: скорость пристёгивания g^+ частиц к зародышу и скорость отстёгивания g^- частиц от зародыша, являются одними из