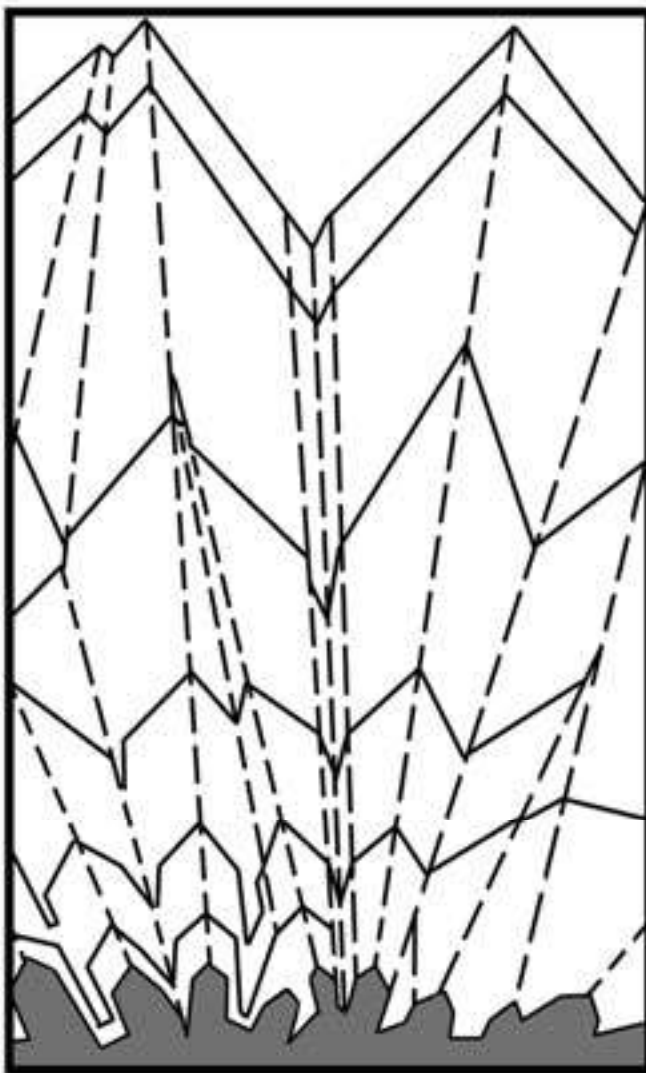




Solidification

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

«Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС-2022), 6–9 апреля 2022 года, г. Ижевск

Международный программный комитет

Peter Galenko, Friedrich-Schiller-Universität, Jena, Germany – председатель
Christoph Beckermann, University of Iowa, USA
Dieter Herlach, Ruhr-University Bochum, Germany
Jürgen Horbach, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Germany
Nikolas Provatas, McGill University, Canada
Markus Rettenmayr, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Germany
Peter W. Voorhees, Northwestern University, USA
Gerhard Wilde, Universität Münster, Germany

Национальный программный комитет

Кривилев Михаил Дмитриевич (УдГУ) – сопредседатель
Харанжевский Евгений Викторович (УдГУ) – сопредседатель

Александров Дмитрий Валерьевич (УрФУ)
Голод Валерий Михайлович (СПбПУ)
Кропотин Валентин Валентинович (НПО МКМ)
Ладьянов Владимир Иванович (УдмФИЦ УрО РАН)
Лебедев Владимир Геннадьевич (НПО МКМ)
Анкудинов Владимир Евгеньевич (ИФВД РАН)
Бельтюков Анатолий Леонидович (УдмФИЦ УрО РАН)
Камаева Лариса Вячеславовна (УдмФИЦ УрО РАН)
Кондрашов Евгений Николаевич (ВСМПО-АВИСМА)
Рыльцев Роман Евгеньевич (ИМет УрО РАН)

Локальный организационный комитет

Бабкина Вера Викторовна (УдГУ)
Борисова Елена Михайловна (УдГУ)
Ворошилов Евгений Сергеевич (УдГУ)
Гордеев Георгий Андреевич (УдГУ)
Груздь Светлана Анатольевна (УдГУ, ИжГТУ)
Данилов Андрей Васильевич (УдГУ)
Зыкин Андрей Владимирович (УдГУ)
Мосина Ринетта Маратовна (УдГУ)
Соломенникова Анастасия Александровна (УдГУ)
Стерхова Ирина Валентиновна (УдмФИЦ УрО РАН)
Щутов Илья Владиславович (УдГУ)

**Кристаллическое зародышеобразование в стеклах
под действием сдвиговой деформации**

А. В. Мокшин, Б. Н. Галимзянов

Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Россия, г. Казань,
ул. Кремлевская 8

В настоящей работе будет представлен подход, позволяющий в рамках статистического рассмотрения выполнить на основе конфигурационных данных - например, на основе данных моделирования молекулярной динамики или экспериментальных данных по микроскопии - количественный расчет характеристик процессов зародышеобразования и роста. Будет показано, что в рамках данного подхода, могут быть определены скорости стационарной и нестационарной нуклеации, скорость роста зародышей, скорость фазового перехода, средние времена ожидания зародышей определенного размера, время индукции, размер критического зародыша/зерна, межфазная энергия, фактор Зельдовича, а также найден наиболее вероятный закон роста формируемого зерна [1, 2].

Выполняется детальное исследование влияние сдвиговой деформации на структурное упорядочение в переохлажденных жидкостях и стеклах. При этом рассматриваются ситуации однородного и неоднородного сдвигов. Выясняется роль притяжения в межчастичном взаимодействии на индуцируемую сдвигом кристаллизацию. Формулируются условия, в соответствии с которыми сдвиговое внешнее воздействие инициирует и ускоряет структурное упорядочение, а также условия, при которых в результате сдвиговой деформации кристаллизация подавляется. Будут представлены аналитические выражения для ключевых характеристик кристаллической нуклеации, управляемой сдвиговой деформацией. В рамках концепции эффективной температуры будет представлена трактовка результатов моделирования неравновесной молекулярной динамики стекольной системы, кристаллизующейся под воздействием сдвига.

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-2-38-1).

[1] Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. Scaling law for crystal nucleation time in glasses // J. Chem. Phys., 2015. Vol. 142. P. 104502.

[2] Mokshin A.V., Galimzyanov B.N., Barrat J.-L. Extension of classical nucleation theory for uniformly sheared systems // Phys. Rev. E, 2013. Vol. 87, P. 062307.