

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина
Ключевой Центр превосходства «Материаловедение перспективных
металлосодержащих материалов и технологий их обработки»

**АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ
ФИЗИЧЕСКОГО МЕТАЛЛОВЕДЕНИЯ
СТАЛЕЙ И СПЛАВОВ**

**ACTUAL PROBLEMS OF THE PHYSICAL
METALLURGY OF STEELS AND ALLOYS**

Сборник тезисов докладов

XXVI Уральская школа металлургов-термистов
(Екатеринбург, 7–11 февраля 2022 г.)

Екатеринбург
Издательство Уральского университета
2022

УДК 669.017(06)
ББК 34.2я431
А43

Рецензенты:

кафедра технологических машин и технологии машиностроения Уральского государственного лесотехнического университета (проф., д-р техн. наук *Б. А. Потехин*);

В. Г. Пушин, проф., д-р физ.-мат. наук, гл. науч. сотр., руководитель отдела электронной микроскопии ЦКП «Испытательный центр нанотехнологий и перспективных материалов» (Институт физики металлов УрО РАН)

Редакционная коллегия:

председатель — проф., д-р техн. наук *А. А. Попов*

зампредседателя — академик РАН *В. М. Счастливец*

ответственный за выпуск — канд. техн. наук *К. И. Луговая*

Члены редакционной коллегии:

проф., д-р техн. наук *М. Л. Лобанов*; проф., канд. техн. наук *С. Л. Демаков*; доц., канд. хим. наук *Н. Г. Россина*; доц., канд. техн. наук *А. Г. Илларионов*; доц., канд. техн. наук *С. В. Беликов*; доц., канд. техн. наук *О. Ю. Корниенко*; доц., канд. техн. наук *М. С. Карабаналов*; доц., канд. техн. наук *С. В. Гриб*; доц., канд. техн. наук *А. С. Юровских*; доц., канд. техн. наук *Ф. В. Водолазский*; доц., канд. техн. наук *С. И. Степанов*; доц., канд. техн. наук *М. А. Жиякова*; доц., канд. техн. наук *Н. А. Попов*, канд. техн. наук *А. Ю. Жияков*; канд. техн. наук *М. А. Зорина*; аспирант *Р. И. Петров*, аспирант *А. А. Корнев*, аспирант *М. А. Шабанов*, аспирант *А. О. Петрова*

Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов = Actual Problems of the Physical Metallurgy of Steels and Alloys : сборник тезисов докладов XXVI Уральской школы металловедов-термистов (Екатеринбург, 7–11 февраля 2022 г.) ; М-во науки и высш. образования РФ. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2022. — 286 с. : ил.

ISBN 978-5-7996-3424-7

Сборник содержит материалы и доклады о достижениях молодых ученых, аспирантов и студентов в области материаловедения легких сплавов и освещает актуальные проблемы развития, обработки, создания и исследования новых металлических и композиционных материалов и покрытий для авиакосмической, морской и других отраслей промышленности.

Сборник предназначен для научных сотрудников, аспирантов и студентов, ведущих исследования в области материаловедения и интересующихся данной тематикой.

УДК 539:669(045)

ББК 34.22я43

Ответственность за содержание и оформление публикуемых материалов несут авторы.

ISBN 978-5-7996-3424-7

© Уральский федеральный университет, 2022

Научные тезисы

УДК 539.1

НОВЫЙ ПОДХОД ДЛЯ ТОЧНОЙ ОЦЕНКИ СКОРОСТНЫХ ФАКТОРОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

**Булат Наилевич Галимзянов^{*}, Динар Тимурович Яруллин,
Анатолий Васильевич Мокшин**

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

** bulatgnmail@gmail.com*

Аннотация. Разработан численный подход, позволяющий оценить скоростные факторы кристаллизации аморфных систем на основе данных моделирования. На примере модельной кристаллизующейся системы рассчитаны скорость пристегивания мономеров к поверхности кристаллических зародышей и скорость отрывания мономеров от зародыша. Полученные результаты вносят существенный вклад в понимание микроскопических механизмов, посредством которых происходит рост и разрушение кристаллитов.

Ключевые слова: фазовые переходы, кристаллизация, аморфные материалы, зародышеобразование, рост кристаллов, кинетика кристаллизации

Финансирование: исследование поддержано средствами гранта Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 20-1-2-38-1).

Scientific thesises

A NEW APPROACH FOR DIRECT EVALUATION OF CRYSTALLIZATION RATE FACTORS

Bulat N. Galimzyanov^{*}, Dinar T. Yarullin, Anatolii V. Mokshin

Kazan (Volga Region) Federal University, Kazan, Russia

** bulatgnmail@gmail.com*

Abstract. A numerical approach has been developed that makes it possible to estimate the rate factors of crystallization of amorphous systems based on simulation data. Using the crystallizing model system, the monomers attachment and detach-

ment rates are calculated. The obtained results make a significant contribution to understanding the microscopic crystallization mechanism.

Keywords: phase transitions, crystallization, amorphous materials, nucleation, crystal growth, crystallization kinetics

Funding: the research was supported by a grant from the Foundation for the Development of Theoretical Physics and Mathematics “BASIS” (project No. 20-1-2-38-1).

Скорость присоединения g^+ частиц к кристаллическим зародышам и скорость отрывания частиц g^- являются основными кинетическими (скоростными) факторами в теориях зарождения и роста кристаллов [1; 2]. Прямое экспериментальное измерение этих скоростных факторов для кристаллизующейся объемной системы является очень сложной задачей. Это связано с трудностями отслеживания траекторий отдельных атомов наноразмерных масштабов.

В настоящей работе мы предлагаем подход для точной оценки скоростных факторов g^+ и g^- . Согласно этому подходу, расчеты можно проводить без использования модельных функций и подгоночных параметров. Мы рассматриваем кристаллизацию переохлажденной леннард-джонсовской жидкости при температуре $T = 0,5\varepsilon / k_B$ и давлении $p = 2,0\varepsilon / \sigma^3$ (здесь ε и σ — параметры потенциала Леннарда-Джонса; k_B — постоянная Больцмана). Хорошо известная особенность этой системы — способность к самопроизвольной кристаллизации после охлаждения ниже температуры плавления T_m [2].

Прямая оценка значений параметров g^+ и g^- была выполнена для кристаллических зародышей, растущих в рассматриваемой системе. Эти скоростные факторы были определены как функции размера зародыша n . Расчеты проводились для зародышей размером до $10n_c$, где n_c — критический размер зародыша. Насколько нам известно, такие расчеты ранее не проводились. Для сравнения наших результатов с другими известными данными моделирования, полученными для переохлажденной системы Леннард-Джонса, а также для переохлажденных расплавов Ni и NiAl, были применены масштабированные коэффициенты. Мы обнаружили, что (n / n_c) — зависимость кинетического фактора скорости g^+ следует степенному закону при размерах зародышей $n > n_c$. Было обнаружено, что в случае зародышей субкритических размеров (при $n < n_c$) этот степенной закон не соблюдается.

Список источников

1. Kelton K. F., Greer A. L. Transient nucleation effects in glass // J. Non-Cryst. Solids. 1986. V. 79. P. 295–309.
2. Yarullin D. T., Galimzyanov B. N., Mokshin A. V. Direct evaluation of attachment and detachment rate factors of atoms in crystallizing supercooled liquids // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. P. 224501 1–7.

References

1. Kelton K. F., Greer A. L. Transient nucleation effects in glass // J. Non-Cryst. Solids. 1986. V. 79. P. 295–309.
2. Yarullin D. T., Galimzyanov B. N., Mokshin A. V. Direct evaluation of attachment and detachment rate factors of atoms in crystallizing supercooled liquids // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. P. 224501 1–7.