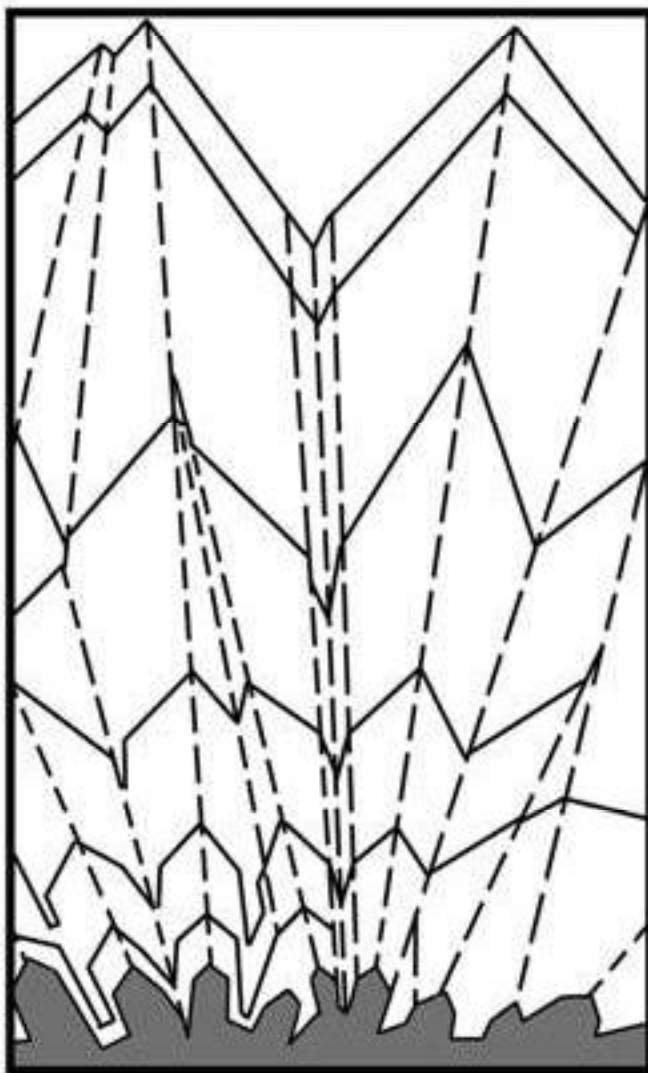




# Solidification

computer simulation,  
experiments and technology



Abstracts of 9<sup>th</sup> 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

- [4] Sidorenko A.S., Morari R.A., Boian V., Prepelitsa A.A., Antropov E.I., Savva Yu.B., Fedotov A.Yu, Sevryukhina O.Yu, Vakhrushev A.V. Hybrid nanostructures superconductor-ferromagnet for superconducting spintronics // Journal of Physics: Conference Series, 2021. Vol. 1758 (1). P. 012037.
- [5] Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu., Sidorenko A.S. Simulation of Multilayer Nanosystems Interface Formation Process for Spintronics // Key Engineering Materials, 2021. Vol. 888. P. 57.

### Формирование пористой структуры в аморфном никелиде титана

А. А. Цыганков, Б. Н. Галимзянов, А. В. Мокшин

Пористые материалы являются перспективным направлением развития вследствие большого количества возможных приложений: костные имплантаты, гасители ударных воздействий, катализаторы в химических реакциях, ячейки хранения водородного топлива, датчики дыма, фильтры. Одним из ключевых факторов, влияющих на конечные характеристики материала, является его пористость. Также имеет значение тип получаемых пор, закрытый или открытый, поскольку это может влиять на конечные свойства и область применения полученного материала [1].

В настоящей работе демонстрируется возможность синтеза аморфного пористого нитинола [2] добавлением аргона в качестве порообразователя. Обнаруживается, что характер зависимости пористости нитинола от концентрации газа при различных температурах нагревания слабо изменяется. При этом максимальная пористость составляет 50 процентов (Рис. 1). В отдельных случаях пористость может достигать 70 процентов. При таких больших значениях пористости поры являются открытыми. Также был оценен средний размер пор, он варьируется от 15 до 50 нанометров.

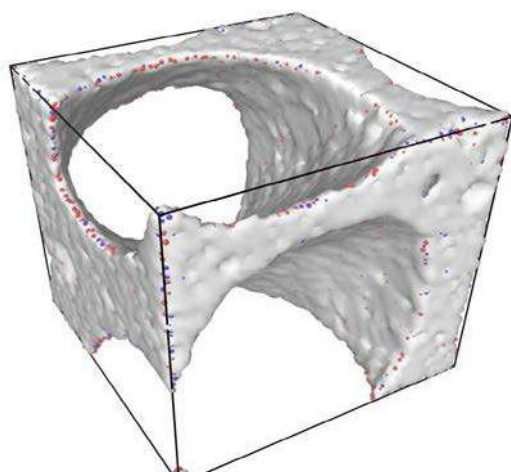


Рисунок 1.  
Образец пористого нитинола. Пористость равна 50 процентам. Красные и синие точки – атомы никеля и титана соответственно. Серым обозначена поверхность материала.

Полученные результаты указывают на возможность экспериментального синтеза аморфного пористого нитинола. Результаты работы могут быть использованы применительно к улучшению существующих технологий, требующих долговечности и прочности пористых материалов.

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

- [1] Liu P.S., Chen G.F. // Chapter Three - Application of Porous Metals, Butterworth-Heinemann (2014). P. 113 – 188.
- [2] Ko W.-S., Grabowski B., Neugebauer J. Development and application of a Ni-Ti interatomic potential with high predictive accuracy of the martensitic phase transition // Physical Review B, 2015. Vol. 92 (13). P. 134107.

### **Некоторые закономерности образования твердой фазы в растворах нитратов железа и кобальта под действием тлеющего разряда**

П. А. Иванова, К. В. Смирнова, А. Н. Иванов, Д. А. Шутов, В. В. Рыбкин

Ивановский государственный химико-технологический университет, 153000 Россия, г. Иваново, просп. Шереметевский 7

Оксиды на основе переходных металлов со структурой шпинели представляют собой важный функциональный материал, который активно изучается в последние годы, в основном благодаря ценным физическим свойствам и высокой химической стабильности [1]. Магнитные ферриты представляют собой группу уникальных магнитных соединений. Феррит-шпинель подходит для различного рода приложений, таких как биомедицина [2], магнитно-резонансная томография (МРТ) [3], катализ [4] и т.д.

К настоящему времени известны различные методы синтеза, однако каждый из методов имеет ряд ограничений. В последнее десятилетие для синтеза ультрадисперсных частиц использовали плазменно-растворный метод синтеза [5]. Этот метод имеет преимущества перед другими методами, такие как недорогое сырье, простое оборудование, отсутствие необходимости в вакуумной камере, отсутствие необходимости в подаче газа, легкое отделение продуктов от раствора, и высокая чистота [6].

В данной работе приведены результаты исследования кинетики образования ультрадисперсных порошков в приповерхностном слое водных растворов нитратов железа (III) и кобальта (II) под действием тлеющего разряда.

Растворы готовили путем растворения нитрата железа  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$  ( $C=3,3$  ммоль/л) и нитрата кобальта  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2$  ( $C=1,67$  ммоль/л) в дистиллированной воде. Плазменно-растворная система представляла собой H-образную ячейку с двумя вынесенными титановыми электродами, таким образом, что раствор в одном плече ячейки являлся катодом (жидкий катод), а в другой – анодом (жидкий анод). После зажигания разряда в анодной части ячейки в течение нескольких минут вблизи контакта плазмы с раствором образуется коллоидная взвесь. Образование твердой фазы в жидком катоде не наблюдается. Получение и анализ частиц условно можно разделить на два этапа. Первый: плазменно-растворный синтез (анализ частиц в растворе и после сушки); второй: