

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Институт физического материаловедения СО РАН  
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова  
Восточно-Сибирский государственный университет технологий и управления

Ministry of Education and Science of the Russian Federation  
Institute of Physical Materials Science SB of the RAS  
Dorzhii Banzarov Buryat State University  
East Siberia State University of Technology and Management

## **НАНОМАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ — VIII**

VIII Международная конференция «Наноматериалы и технологии»  
VIII Международная конференция по материаловедению  
III Международная молодежная конференция  
«Наноматериалы и технологии»  
V Китайско-Монгольско-Российская конференция  
по функциональным материалам

*24–28 августа, 2019, Улан-Удэ — оз. Байкал, Россия*

## **NANOMATERIALS AND TECHNOLOGIES — VIII**

VIII International Conference «Nanomaterials and Technologies»  
VIII International Conference on Material Science  
III International Youth Conference  
«Nanomaterials and technologies»  
V Sino-Mongolian-Russian Conference  
on Functional Materials

*August 24–28, 2019 — Baikal Lake, Russia*

Улан-Удэ  
Издательство Бурятского госуниверситета  
2019

УДК 53:54  
ББК 22.3:24  
Н 21

*Текст в авторской редакции*

Н 21 **Наноматериалы и технологии — VIII** : труды VIII Международной конференции «Наноматериалы и технологии», VIII Международной конференции по материаловедению, III Международной молодежной конференции «Наноматериалы и технологии», V Китайско-Монгольско-Российской конференции по функциональным материалам (Улан-Удэ, 24–28 августа 2019 г.) / науч. ред. В. В. Сызранцев. — Улан-Удэ : Издательство Бурятского госуниверситета, 2019. — 496 с.  
ISBN 978-5-9793-1398-6

В статьях конференции отражены проблемы и перспективы применения наноматериалов в современных технологиях. Включены результаты исследований по трем направлениям: математическое и компьютерное моделирование материалов и технологий, физика конденсированного состояния, функциональные материалы.

**Nanomaterials and Technologies — VIII** : Proceedings of the 8<sup>th</sup> International Conference «Nanomaterials and Technologies», the 8<sup>th</sup> International Conference on Materials Science, the III International Youth Conference «Nanomaterials and technologies», the 5<sup>th</sup> Sino-Mongolian-Russian Conference on Functional Materials (Ulan-Ude, August, 24–28, 2019) / sci. ed. V. V. Syzrantsev. — Ulan-Ude: Buryat State University Publishing Department, 2019. — 496 p. ISBN 978-5-9793-1398-6

Proceedings of the conference are devoted to the problems of using nanomaterials in modern technologies. It includes the results in three areas: mathematical and computer modeling of materials and technologies, condensed matter physics, functional materials.

УДК 53:54  
ББК 22.3:24

ISBN 978-5-9793-1398-6

© Бурятский госуниверситет им. Д. Банзарова, 2019

# **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ И ТЕХНОЛОГИЙ**

## **РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК ФОРМИРОВАНИЯ И РОСТА НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ПЕРЕОХЛАЖДЕННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ ПО ДАННЫМ МОДЕЛИРОВАНИЯ**

**© Б. Н. Галимзянов<sup>1,2</sup>, А. В. Мокшин<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> - Казанский федеральный университет, 420008, Россия, г. Казань

<sup>2</sup> - Удмуртский федеральный научный центр Уральского отделения Российской академии наук, 426067, Россия, г. Ижевск  
е-майл: bulatgnmail@gmail.com

### **Аннотация**

*В настоящей работе мы изучаем влияние уровня переохлаждения на формирование и рост нанокристаллитов в однокомпонентной металлической пленке. Одним из основных результатов является прямое доказательство того, что кристаллизация рассматриваемой системы инициируется через механизм гомогенного зародышеобразования даже при глубоких уровнях переохлаждения. Показано, что при низких уровнях переохлаждения система образует монокристалл, тогда как поликристаллическая структура образуется при глубоких уровнях переохлаждения. Это следует непосредственно из результатов кластерного анализа и рассчитанных дифракционных картин.*

**Ключевые слова:** кристаллизация, металлическая пленка, переохлажденная жидкость, аморфная система, зародышеобразование, рост кристаллов, моделирование атомарной динамики.

## **CALCULATION OF NANOCRYSTALLINE STRUCTURES FORMATION AND GROWTH CHARACTERISTICS IN SUPERCOOLED METALLIC FILM BASED ON SIMULATION DATA**

**B. N. Galimzyanov<sup>1,2</sup>, A. V. Mokshin<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> - Kazan Federal University, 420008 Kazan, Russia

<sup>2</sup> - Udmurt Federal Research Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
426067 Izhevsk, Russia  
e-mail: bulatgnmail@gmail.com

### **Abstract**

In the present work, we study the influence of a supercooling level on formation and growth of nanocrystallites in a single-component metallic film. One of the main results of our study is direct evidence that the crystallization of the considered system is initiated through the homogeneous nucleation mechanism even at deep levels of supercooling. It is shown that the system forms a single crystal at low levels of supercooling, whereas a polycrystalline structure is formed at deep supercooling levels. This follows directly from the results of cluster analysis and calculated diffraction patterns.

**Keywords:** crystallization, metallic film, supercooled liquid, amorphous system, nucleation, crystal growth, simulation of atomistic dynamics.

Как известно, переохлажденные жидкости и стекольные системы в основном получают быстрым охлаждением равновесной жидкости до температур, расположенных значительно

ниже температуры плавления [1]. Это позволяет избежать или существенно замедлить процесс кристаллизации. Несмотря на достигнутые успехи в изучении процессов кристаллизации в переохлажденных жидкостях и стекольных системах, до сих пор не утихают споры о механизмах, инициирующих подобные структурно-фазовые трансформации. Так, например, на вопрос «Все ли стекольные системы кристаллизуются?» в настоящее время нет однозначного ответа [2]. С другой стороны, нет ясного понимания влияния переохлаждения на структурные особенности возникающих кристаллических зародышей, а также на их морфологические характеристики.

В настоящей работе рассматривается процесс кристаллизации ультратонкой металлической пленки при различных уровнях переохлаждения. На основе данных моделирования атомарной динамики рассчитываются основные нуклеационные характеристики, а также выполняется структурный анализ. Рассматривается система Джугутова, состоящая из 14700 одинаковых частиц (атомов) [3, 4]. Ячейка моделирования имеет объем  $V = L_x L_y L_z$ , где  $L_x = L_y \approx 11.5 L_z$  и  $L_z \approx 4.8 \sigma$  (здесь  $\sigma$  - эффективный диаметр атома). Моделирование выполняется в изобарно-изотермическом ансамбле. Переохлажденные и стекольные образцы получаются быстрым изобарическим охлаждением равновесной жидкости с температурой  $T = 3.0 \epsilon/k_B$  (здесь  $\epsilon$  - единица энергии,  $k_B$  – постоянная Больцмана). Эти образцы генерируются для термодинамических состояний с давлением  $p = 15 \epsilon/\sigma^3$  и при температурах в диапазоне от  $T = 0.5 \epsilon/k_B$  до  $T = 1.4 \epsilon/k_B$ . При изобаре  $p = 15 \epsilon/\sigma^3$  температура стеклования и температура плавления системы составляют  $T_g \approx 0.78 \epsilon/k_B$  и  $T_m \approx 1.72 \epsilon/k_B$ , соответственно.

Для распознавания кристаллических структур выполняется кластерный анализ, основанный на определении параметров локального ориентационного порядка [5]. Информация о кристаллической структуре получается через оценку структурного фактора  $S(k_x, k_y)$ , спроектированного на плоскость  $xy$  [6]. Методом инвертированного усреднения, детально описанным в работах [7, 8], для каждого рассматриваемого термодинамического состояния оценивается время ожидания  $\tau_c$  первого крупного кристаллического зародыша критического размера. Отметим, что критическим считается размер (число частиц), при котором зародыш способен к устойчивому росту.

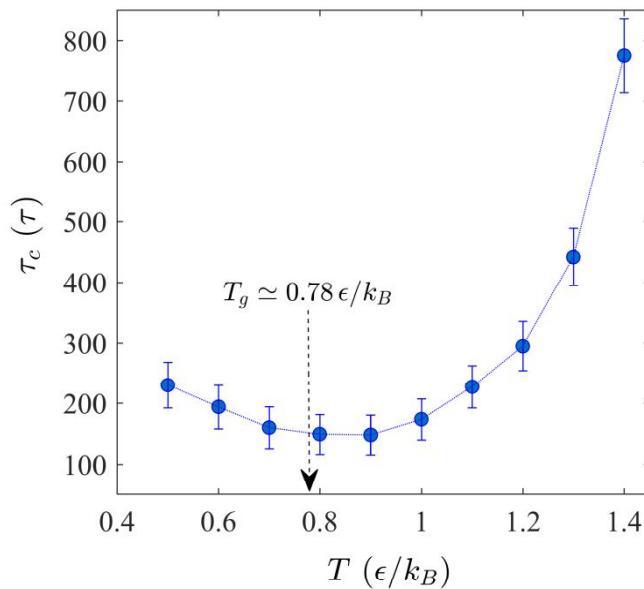


Рисунок 1. Температурная зависимость времени ожидания первого зародыша критического размера.

На рисунке 1 приводится температурная зависимость времени ожидания  $\tau_c$ . Как видно из рисунка, что уровень переохлаждения может оказывать как положительное, так и отрицательное влияние на время формирования стабильных кристаллитов. Наименьшее время ожидания зародыша критического размера для рассматриваемой кристаллизующейся системы достигается при температурах в диапазоне от  $T = 0.8 \varepsilon/k_B$  до  $T = 1.0 \varepsilon/k_B$ , соответствующим умеренным уровням переохлаждения. При глубоких уровнях переохлаждения (при температурах  $T < 0.8 \varepsilon/k_B$ ), зародышобразование замедляется растущей вязкостью, в то время как при малых переохлаждениях (при температурах  $T > 1.0 \varepsilon/k_B$ ) основной причиной увеличения времени ожидания зародыша является уменьшение движущей силы зарождения новой фазы (разности химических потенциалов двух фаз).

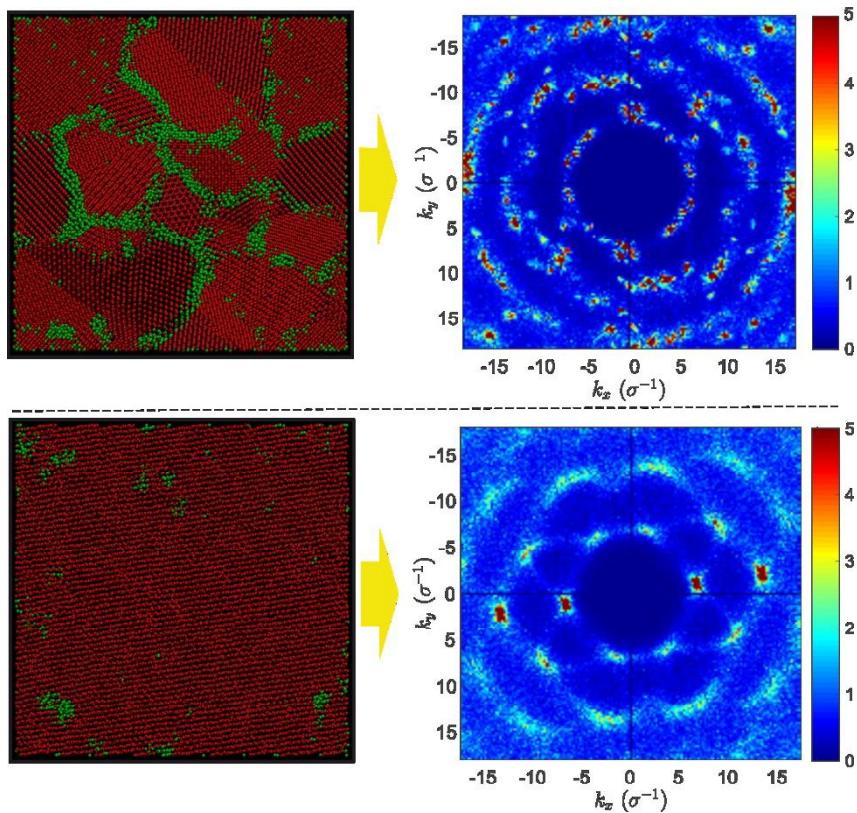


Рисунок 2. (верхние панели) Мгновенный снимок системы с поликристаллической структурой и соответствующая этой структуре рассчитанная дифракционная картина  $S(k_x, k_y)$  при температуре  $T = 0.5 \varepsilon/k_B$ . (нижние панели) Монокристалл, образованный при температуре  $T = 1.4 \varepsilon/k_B$ . Здесь дифракционная картина  $S(k_x, k_y)$  соответствует гранецентрированной кубической структуре.

Рисунок 2 показывает мгновенные снимки конфигурации кристаллической системы, образованной при малых и глубоких уровнях переохлаждения. Из рисунка 2 (верхние панели) видно, что при глубоких уровнях переохлаждения образуется поликристаллическая структура, состоящая из нескольких разориентированных кристаллических доменов. Это подтверждается рассчитанной дифракционной картиной  $S(k_x, k_y)$ , содержащей случайно распределенные пятна, что свидетельствует об отсутствии предпочтительной пространственной ориентации кристаллической решетки. В то же время, при малых уровнях переохлаждения (см. рисунок 2 [нижние панели]) система образует монокристалл. В этом случае кольца в  $S(k_x, k_y)$  исчезнет полностью. Шестикратная симметрия дифракционной

картины  $S(k_x, k_y)$  соответствует кристаллической структуре с гранецентрированной кубической решеткой [9].

Таким образом, одним из наших основных результатов является прямое доказательство того, что кристаллизация однокомпонентной системы инициируется через механизм зародышеобразования даже на глубоких уровнях переохлаждения. Мы показали, что температурная зависимость времени ожидания нуклеации имеет немонотонный характер, аналогичный тому, который наблюдается при гомогенном зарождении кристаллов в объемных переохлажденных системах [3]. Также мы находим, что система образует монокристалл при низком переохлаждении, тогда как поликристаллическая структура образуется при глубоких уровнях переохлаждения.

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

### **Список литературы**

1. Kelton K.F., Greer A.L. Nucleation in Condensed Matter: Application in Materials and Biology, Pergamon: Oxford, 2010.
2. Schmelzer J.W.P, Tropin T.V. Reply to “Comment on ‘Glass Transition, Crystallization of Glass-Forming Melts, and Entropy’” by Zanotto and Mauro // Entropy. 2018. Vol. 20. P. 704.
3. Galimzyanov B.N., Yarullin D.T., Mokshin A.V., Structure and morphology of crystalline nuclei arising in a crystallizing liquid metallic film // Acta Materialia. 2019. Vol. 169. P. 184-192.
4. Roth J. The fluid-solid transition of Dzugutovs potential // Eur. Phys. J. B. 2000. Vol. 14. P. 449-458.
5. Mickel W., Kapfer S. C., Schröder-Turk G. E., Mecke K. Shortcomings of the bond orientational order parameters for the analysis of disordered particulate matter // J. Chem. Phys. 2013. Vol. 138. P. 044501.
6. Jaiswal A., Egami T., Zhang Y. Atomic-scale dynamics of a model glass-forming metallic liquid: dynamical crossover, dynamical decoupling, and dynamical clustering // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 91. P. 134204.
7. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. Steady-state homogeneous nucleation and growth of water droplets: extended numerical treatment // J. Phys. Chem. B. 2012. Vol. 116. P. 11959-11967.
8. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. A Method for Analyzing the Non-Stationary Nucleation and Overall Transition Kinetics. A Case of Water // J. Chem. Phys. 2014. Vol.140. P. 024104.
9. Carter C.B., Williams D.B. Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science, Springer: New York, 2009.