



**XVIII Международная школа-конференция
"Проблемы физики твердого тела
и высоких давлений"**

**Идеи и методы
физики
конденсированного
состояния, III**

**Сочи, пансионат "Буревестник"
18-29 сентября 2019г.**

ТЕЗИСЫ

XVIII Школа-конференция молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" продолжает регулярную серию школ, которые проводились Институтом физики высоких давлений РАН каждые два года, начиная с 1989г. С 2015 года Школа-конференция проводится ежегодно совместно с Физическим институтом РАН. В данный сборник входят как тезисы лекций приглашенных лекторов, так и тезисы оригинальных докладов молодых участников.

ISBN 978-5-902622-40-6

© Авторы докладов

УНИВЕРСАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ В ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЯХ КИНЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРИСТАЛЛИЗАЦИИ РАЗЛИЧНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТЕКОЛ

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

Казанский федеральный университет, Институт физики,
Казань

yarullindt@gmail.com

Выявление универсальных закономерностей в температурных зависимостях кинетических характеристик кристаллизации является одной из актуальных задач физики конденсированного состояния и материаловедения. Обнаружение таких универсальностей дает возможность предсказывать поведение совершенно разных типов систем в различных термодинамических условиях, в том числе, определять наличие/отсутствие общих физико-механических свойств. Использование приведенной температурной шкалы является обязательным условием для выявления универсальности в температурных зависимостях кинетических характеристик кристаллизации, например, таких как скорость зародышеобразования, скорость роста кристаллитов и скорость присоединения частиц к поверхности кристаллитов. Одной из главных проблем при решении данной задачи является отсутствие подходящей температурной шкалы, ранжирующей температурную область в интервале $0 \leq T \leq T_m$ (T_m – температура плавления системы) одинаковым образом для различных типов систем. Здесь, наиболее распространенными являются приведенные температуры T/T_m и T/T_g (T_g – температура стекольного перехода), которые не позволяют охватить широкий температурный интервал и выполнить единое ранжирование, так как температура T_g зависит от скорости охлаждения и других факторов, в том числе, может принимать разные значения для системы одного и того же типа.

В настоящей работе вводится приведенная температура \bar{T} , определяемая выражением следующего вида [1]

$$\bar{T} = K_1 \left(\frac{T}{T_g} \right) + K_2 \left(\frac{T}{T_g} \right)^2, \quad (1)$$

где

$$K_1 = \left(\frac{0.5 - \left(\frac{T_g}{T_m}\right)^2}{1 - \frac{T_g}{T_m}} \right), K_2 = \left(\frac{\frac{T_g}{T_m} - 0.5}{\frac{T_m}{T_g} - 1} \right). \quad (2)$$

Здесь входными параметрами являются температура стеклования T_g и температура плавления T_m . Приведенная \tilde{T} -шкала не зависит от типа системы и способа приготовления стекольного состояния.

В работе рассмотрены экспериментально рассчитанные температурные зависимости коэффициента поверхностной самодиффузии D_s для различных типов кристаллизующихся молекулярных стекол, среди которых орто-терфенил, гризофульвин, индометацин и нифедипин, которые широко применяются в фармацевтической промышленности [2]. Величина D_s является кинетическим параметром, характеризующим мобильность частиц (атомов, молекул), и эта величина непосредственно связана со скоростью присоединения частиц к поверхности кристаллических зародышей, формирующихся в этих системах. Показано, что величина D_s как функция от приведенной температуры \tilde{T} , описывается степенной зависимостью

$$\frac{D_s(\tilde{T})}{D_s^*(g)} = (2\tilde{T})^\chi. \quad (3)$$

Здесь $D_s^*(g)$ - коэффициент поверхностной самодиффузии при температуре T_g . Обнаружено наличие корреляции между показателем степени χ и индексом хрупкости m , введенным Энджеллом для классификации стеклообразующих жидкостей [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-12-00022).

Литература

1. A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, PCCP. **19**, 11340, **2017**
2. C. Huang, S. Ruan, T. Cai, L. Yu, J. Phys. Chem. B **121**, 9463, **2017**
3. L.-M. Wang, V. Velikov, C.A. Angell, J. Chem. Phys. **117**, 10184, **2002**