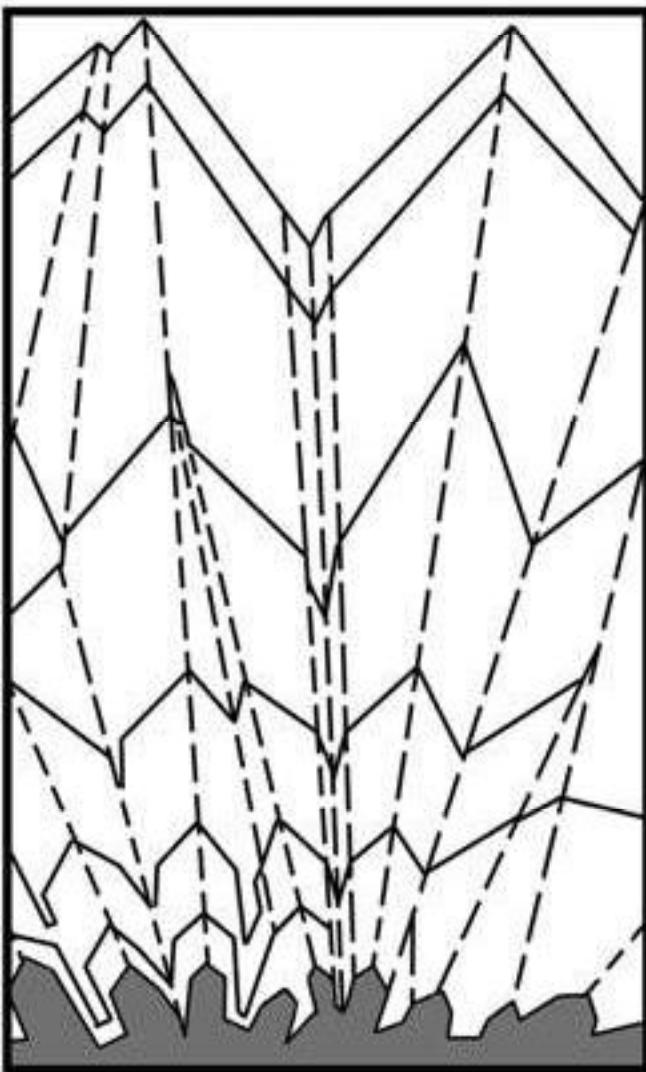




# Solidification

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

**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.