

Институт теплофизики  
Уральское отделение РАН

**V Российская конференция**  
с элементами научной школы для молодых ученых

**МЕТАСТАБИЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ  
И  
ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ**

посвященная 90-летию со дня рождения  
академика В.П. Скрипова

17-19 октября 2017 г.  
Екатеринбург, Россия

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Екатеринбург 2017

УДК 532:536

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ V Российской конференции с элементами научной школы для молодых ученых «Метаустойчивые состояния и флуктуационные явления», посвященной 90-летию со дня рождения академика В.П. Скрипова, Екатеринбург: ИТФ УрО РАН, 2017 – 86 с.

ISB 978-5-

Сборник содержит тезисы докладов, представленных на V Российской конференции с элементами научной школы для молодых ученых «Метаустойчивые состояния и флуктуационные явления» по следующим направлениям: фундаментальные вопросы фазовой метастойчивости; молекулярно-динамическое моделирование; флуктуационные явления и теплообмен при фазовых превращениях; кипение, конденсация и кристаллизация; поверхностные явления; теплофизические свойства.

**Председатель оргкомитета:**

Байдаков В.Г., д.ф.-м.н.

**Ученый секретарь:**

Волосников Д.В., к.ф.-м.н.

**Научный комитет:**

Коверда В.П., чл.-корр. РАН

Маркович Д.М., чл.-корр. РАН

Норман Г.Э., д.ф.-м.н.

Станкус С.В., д.ф.-м.н.

Файзуллин М.З., д.ф.-м.н.

Шмельцер Ю.В.П., д.ф.-м.н.

Щекин А.К., чл.-корр. РАН

Конференция проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-08-20470) и Федерального агентства научных организаций России (проект № 007-02-1409)

Издание сборника произведено с авторских листов участников конференции. За ошибки и опечатки авторы издательства ответственности не несет.

ISB 978-5-

© ИТФ УрО РАН, 2017

# ЧТО МЫ МОЖЕМ УЗНАТЬ О ПРОЦЕССАХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ И РОСТА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ?

**Мокшин А.В.\***

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики, Казань, Россия*

\*e-mail: [anatolii.mokshin@mail.ru](mailto:anatolii.mokshin@mail.ru)

Образование зародышей новой фазы и их последующий рост представляет собой общий сценарий протекания фазовых переходов первого рода в случае метастабильных систем вне области спинодали. В соответствии с классической теорией нуклеации ожидается, что с увеличением уровня метастабильности пространственный масштаб, характеризующий размер критического зародыша (критический размер), уменьшается: устойчивый рост зародыша становится возможным в случае, когда число структурных единиц (атомов, молекул, частиц), его образующих, достигает значений  $\geq 10$ . При таких условиях применение традиционных экспериментальных методов для исследования начальных этапов фазовых переходов, соотносимых с процессами зародышеобразования и роста, становится затруднительным. Однако, с другой стороны, именно наличие малых характерных пространственных масштабов открывает широкие возможности для использования методов моделирования молекулярной динамики.

В настоящем докладе будут представлены методы и подходы, позволяющие в рамках статистического рассмотрения выполнить на основе данных моделирования молекулярной динамики количественный расчет практически всех характеристик процессов зародышеобразования и роста: скорости стационарной и нестационарной нуклеации (зародышеобразования), скорость роста зародышей, скорость фазового перехода, средние времена ожидания зародышей определенного размера, время индукции, размер критического зародыша, свободную поверхностную энергию, фактор Зельдовича, форм-фактор зародыша, а также оценить наиболее вероятный закон роста [1-5]. Работа частично поддержана грантом Президента РФ (молодые доктора наук) (грант № МД-5792.2016.2).

## *Литература*

1. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // J. Chem. Phys. 2015. V.142. 104502.
2. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // J. Chem. Phys. 2014. V.140. 024104.
3. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N., Barrat J.-L. // Phys. Rev. E. 2013. V.87. 062307.
4. Mokshin A.V., Galimzyanov B.N. // J. Phys. Chem. B. 2012. V.116. 11959.
5. Mokshin A.V., Barrat J.-L. // Phys. Rev. E. 2010. V.82. 021505.

# ВЯЗКОСТНЫЕ И АКУСТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В РАСПЛАВЕ КОБАЛЬТА: ТЕОРИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

**Хуснутдинов Р.М.,\*<sup>1,2</sup> Мокшин А.В.<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, Россия

\*e-mail: [khrm@mail.ru](mailto:khrm@mail.ru)

Представлены результаты теоретического и экспериментального исследования атомарной динамики расплава кобальта в температурном диапазоне  $T = [1400; 2000]$  К при давлении  $p = 1.5$  бар. Получены теоретические выражения для спектральной плотности временной корреляционной функции тензора напряжений и кинематической вязкости, определяемые через частотные и термодинамические параметры системы.

Найдены температурные зависимости кинематической вязкости для расплава кобальта двумя независимыми методами: (1) численно, на основе данных моделирования атомарной динамики с помощью анализа временных корреляционных функций поперечного потока в рамках обобщенной гидродинамики и с помощью интегрального соотношения Кубо-Грина, а также (2) теоретически, в рамках формализма функций памяти Цванцига-Мори с помощью самосогласованного подхода. Установлено хорошее согласие результатов теоретических расчетов для температурной зависимости кинематической вязкости расплава кобальта с экспериментальными данными и результатами моделирования атомарной динамики.

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты были выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МД-5792.2016.2.