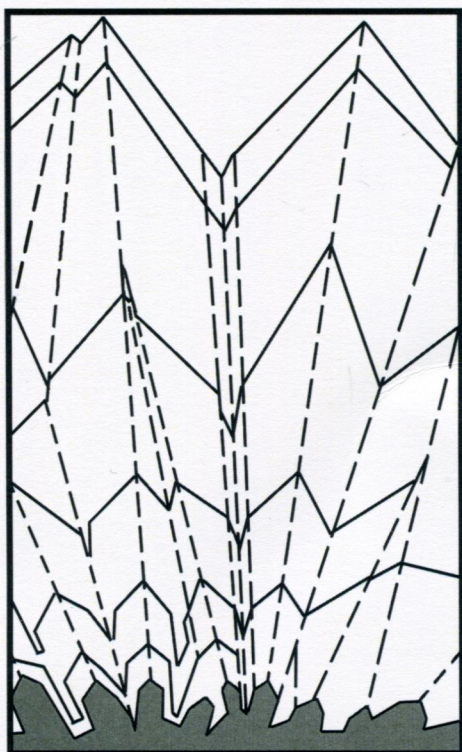




Solidification

computer simulation,
experiments and technology



Abstracts of 9th 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
VIII Международной конференции
6–9 апреля 2022 года

УдмФИЦ УрО РАН

Ижевск
2022

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)

ББК 34.3

K26

Главный редактор П. К. Галенко
Ответственный редактор Л. В. Камаева

K26 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.

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)

ББК 34.3

© Коллектив авторов, 2022

© УдмФИЦ УрО РАН, 2022

ISBN 978-5-6047339-4-3

Оглавление

От редакции.....	8
Секция I: Теория и эксперимент процессов затвердевания.	
Рост и морфология кристаллов.....	9
Galenko P.K. Kinetic phase field model versus molecular dynamics: analysis of solidification and melting data.....	11
Александров Д.В., Федотов С.П. О точных аналитических решениях уравнения Смолуховского для коагуляции частиц.....	14
Маковеева Е.В. К теории остальдова созревания на заключительной стадии фазового перехода.....	16
Son L. Slow relaxation in a binary melt near the liquidus.....	18
Chitchekatchev N.M., Ryltsev R.E. Modeling multicomponent high-entropy alloys with machine learning and genetic algorithms.....	20
Рыльцев Р.Е., Щелкачев Н.М. Структурная наследственность между жидким и твердым состояниями в задачах предсказания структуры материалов и разработки межчастичных потенциалов.....	21
Гусакова О.В., Шепелевич В.Г. Особенности влияния многокомпонентного легирования на процессы затвердевания и термические свойства силуминов при различных скоростях охлаждения расплава.....	23
Ryzhov V.N., Gaiduk E.A., Fomin Y.D., Tsiok E.N. Peculiarities of computer simulation of melting of two-dimensional systems.....	25
Мокшин А.В., БГалимзянов Б.Н. Кристаллическое зародышеобразование в стеклах под действием сдвиговой деформации.....	27
Попов В.Н. Моделирование процесса гетерогенного зародышеобразования на сферической частице.....	28
Титова Е.А. Граничный интеграл задачи роста неосесимметричного дендрита в вынужденном потоке.....	31
Анкудинов В.Е. Формирование и устойчивость кристаллических структур в двухмодовой модели кристаллического фазового поля.....	32
Дудоров М.В., Дрозин А.Д., Стрюков А.В., Рошин В.Е. Математическая модель затвердевания эвтектического расплава при скоростном охлаждении на медном вращающемся барабане.....	34
В. А. Копытов В.А., В. Г. Лебедев В.Г., В. И. Ладьянов В.И. Изотермическая фазово-полевая модель γ - α превращений в железе.....	37
Цепелев В.С., Чикова О.А., Вьюхин В.В., Синицин Н.И. Вязкость жидких сплавов Cu-Co.....	39
Заморянская М.В., Харанжевский Е.В., Галенко П.К., Кириленко Д.А., Яговкина М.А., Орехова К.Н. Влияние скорости охлаждения на структуру и свойства сплава на основе Pd-Ni-Cu-P.....	42

Международная конференция

Bokov A.V., Salamatin D.A., Magnitskaya M.V., Krylov V.I., Tsvyashchenko A.V. Magnetic hyperfine field studies in the cubic Laves phases $Y(Fe_{1-x}Ni_x)_2$ synthesized under high pressure	44
Созонова Н.М., Бакиева О.Р. Моделирование формирования атомной структуры поверхности металла при ионном облучении.....	45
Балякин И.А., Рыльцев Р.Е., Ремпель А.А. Переносимость потенциалов на основе искусственных нейронных сетей: пример скандия	47
Писарев В.В., Grossi J.S. Двухтемпературное атомистическое моделирование роста кристалла в металлическом расплаве.....	48
Стерхова И.В., Камаева Л.В., Ладьянов В.И., Щелкачев Н.М. Исследование процессов затвердевания расплавов $(Fe_{0,75}B_{0,15}Si_{0,1})_{100-x}Ta_x$ ($x=0-4$).....	49
Меньшикова С.Г., Щелкачев Н.М., Бражкин В.В. Локальная структура высокотемпературного расплава $Al_{86}Ni_2Co_6Gd_6$ и его затвердевание под высоким давлением	51
Баталова Е.А., Камаева Л.В., Щелкачев Н.М. Влияние ближнего порядка на вязкость и процесс кристаллизации расплавов $Al - Mg$	53
Бердников В.С., Кислицын С.А., Митин К.А., Винокуров В.В., Винокуров В.А. Конвективный теплообмен в расплавах в методе Чохральского в режимах вращения кристаллов и тиглей.....	56
Kulikova T.V., Bykov V.A., Kovalenko D.A., Ryltsev R.E. Crystallization kinetics in $Cu_{50}Zr_{42.5}Ti_{7.5}$ bulk metallic glass.....	58
Tsiok E.N., Fomin Yu.D., Gaiduk E.A., Ryzhov V.N. New mechanism of structural transition in 2D Hertzian spheres in the presence of random pinning.....	59
Shchukin I.A., Fomin Yu.D. Crystal structure of a system with three-body interactions in strong confinement.....	60
Хуснутдинов Р.М., Хайруллина Р.Р., Суслов А.А., Ладьянов В.И., Мокшин А.В. Ближний порядок в переохлажденных переходных металлах	61
Галимзянов Б.Н., Доронина М.А., Мокшин А.В. Рост кристаллов в сплаве $Ni_{62}Nb_{38}$ при сверхвысоких давлениях.....	62
Яруллин Д.Т., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В. Прямая оценка кинетических факторов кристаллизации аморфных систем.....	63
Юнусов М.Б., Хуснутдинов Р.М. Мокшин А.В. Первопринципные молекулярно-динамические исследования свойств газовых гидратов	65
Starodubtsev Yu.N., Tsepelev V.S. Isobaric thermal expansivity and isothermal compressibility of liquid metals at melting point	67
Tyagunov A.G., Baryshev E.E., Tyagunov G.V. The influence on niobium and titanium on electrical resistivity in liquid state and solidification of IN718 alloy	69
Бердников В.С., Митин К.А., Кислицын С.А. Эволюция полей температуры в кристалле в процессе выращивания методом Чохральского	71

Международная конференция

Майорова А.В., Куликова Т.В., Котенков П.В., Быков В.А. Новые критерии прогнозирования составов сплавов системы Y-Sc-Co-Al со стеклообразующей способностью.....	75
Бронникова Ю.И., Камаева Л.В., Ладьянов В.И. Исследование процессов кристаллизации расплавов Al-Cu-Co при 15 ат. % Co методом ДТА	76
Куликова Т.В., Быков В.А., Коваленко Д.А., Рыльцев Р.Е. Кинетика кристаллизации объемно-аморфного сплава Gd ₂₀ Ho ₂₀ Sc ₂₀ Co ₂₀ Al ₂₀	77
Голод В.М., Добош Л.Ю. Анализ мезомасштабной дендритной неоднородности при затвердевании многокомпонентных алюминиевых сплавов	79
Гусакова О.В., Шепелевич В.Г. Микроструктура сплава Al-Si легированного металлами при высокоскоростном затвердевании	82
Данилова А.С., С. Г. Меньшикова С.Г., Шушков А.А., Ладьянов В.И. Микроструктура и механические свойства сплава Al ₉₀ Gd ₁₀ после баротермической обработки	85
Бердников В.С., Кислицын С.А., Митин К.А., Гришков В.А. Влияние режимов нестационарного сопряжённого теплообмена на форму фронта кристаллизации в методе Бриджмена-Стокбаргера.....	86
Латыпов Т.И., Камаева Л.В., Щелкачев Н.М. Влияние концентрации Co на переохлаждения расплавов Al-Cu-Co при 25 атомных % Cu.....	89
Magnitskaya M.V., Kamaeva L.V., Chtchelkatchev N.M., Suslov A.A., Tsvyashchenko A.V. Structural transformations and thermal stability of RhGe synthesized under high temperature and pressure	90
Бердников В.С., Кислицын С.А., Митин К.А., Гришков В.А., Михайлов А.В. Влияние нестационарного сопряжённого теплообмена на форму фронта кристаллизации в методе горизонтальной направленной кристаллизации	92
Бельтюков А.Л., Русанов Б.А., Ягодин Д.А., Мороз А.И., Стерхов Е.В., Сон Л.Д., Ладьянов В.И. Релаксация в аморфизирующихся расплавах Al-R (R = Ce, Sm).....	94
Salamatın D.A., Bokov A.V., Sidorov V.A., Surowiec Z., Magnitskaya M.V., Chtchelkachev N.M., E. V. Altynbaev E.V., Skanchenko D.O., Wiertel M., Budzynski M., Tsvyashchenko A.V. The crystal and magnetic properties of the FeRhGe ₂ compound	96
Торопова Л.В., Асеев Д.Л., Осипов С.И., Иванов А.А. Математическое моделирование нелинейной динамики затвердевания бинарного расплава с двухфазной зоной.....	99
Фархутдинов А.Р. Исследование однокомпонентной системы Леннарда-Джонса при низких скоростях охлаждения методами молекулярной динамики и регрессионного анализа	100

Khairullina R.R., Sazanov A.V., Khusnutdinoff R.M. Electrofreezing of Supercooled Water in Graphene Nanoconfinement	101
Чаусов Ф.Ф., Суксин Н.Е., Холзаков А.В., Ломова Н.В., Казанцева И.С. Кластерная структура кристаллических фаз по данным ТГА/ДТА в изодиморфном ряду замещения $[Cu_xNi_{(1-x)}\{N(CH_2PO_3)_3\}]Na_4 \cdot nH_2O$ ($x = 0 \dots 1$).....	104
Chhtchelkatchev N.M., R. E. Ryltsev R.E. The uncertainty of glass transition temperature in molecular dynamics simulations and numerical algorithm for its unique determination	107
Секция II: Металлургические и литейные технологии. Системы САПР.	
Метод фазового поля и расчет микроструктур.	
Панов А.Г., Шаехова И.Ф., Болдырев А.В., Болдырев С.В. О величинах теплофизических свойств и влиянии их разброса на моделирование изотермической заковки высокопрочных чугунов с шаровидным и вермикулярным графитом.....	111
Кондрашов Е.Н., Коновалов Л.В. Автоматизация управления печью ВДП при выплавке сплавов на основе титана.....	113
Иванов И.А., Дуб А.В., Дрёмов В.В., Купер К.Э., Кривилев М.Д., Черепецкая Е.Б., Дуб В.С. Новые теоретические и экспериментальные данные о затвердевании как двухстадийном процессе	116
Зинченко С.А. Технология смягчающей обработки блюмов из стали 25Х17Н2Б-Ш	119
Мурадян О.С. Особенности кристаллизации высокоазотистых сталей.....	122
Колесниченко И.В., Мамыкин А.Д., Мандрыкин С.Д., Халилов Р.И. Генерация течения с помощью электромагнитных сил в цилиндрическом объеме с жидким металлом в ходе кристаллизации	126
Кропотин Н.В., Галенко П.К., Фанг Й., Сейринг М., Липпманн С., Фрайберг К., М. Реттенмайр М., Пиномаа Т., Проватас Н., Дж.Гао Моделирование формирования микроструктуры при затвердевании никелевого суперсплава Инконель 718	128
Любимова Т.П., Паршакова Я.Н. Влияние высокочастотных вибраций на морфологическую неустойчивость фронта кристаллизации	129
Shurygin D.A., Levkov L.Ya., DubV.S., Orlov S.V., Ulyanov M.V., Terekhin D.K. Influence of special solidification conditions of steel ingots on the formation of their structure and characteristics of non-metallic inclusions	130
Уткина К.Н., Левков Л.Я., Житенев А.И., Федоров А.С., Сапунов А.Л., Бурда А.В. Исследование влияния условий кристаллизации на формирование структуры супердуплексных сталей	131

Международная конференция

Груздь С.А., Самсонов Д.С., Кривилев М.Д. Математическая модель течения припоя за счет сил смачивания при его плавлении в алюминиевой трубке в условиях микрогравитации	132
Мальгинов А.Н., Дуб В.С., Иванов И.А., Колпишон Э.Ю., Тохтамышев А.Н., Соловьева М.С. Особенности затвердевания крупных кузнечных слитков, полученных методом сифонной разливки, по сравнению со слитками, залитыми сверху, выявленные при математическом моделировании	134
Лосев Г.Л., Мамыкин А.Д. Управление процессом направленной кристаллизации посредством изменения фаз токов линейной индукционной машины	137
Шутов И.В., Королев М.Н., Кривилев М.Д. Исследование особенностей структурообразования при смачивании поверхности АМг3 расплавом припоя Zn-Al-Cu при высокотемпературной пайке	138
Лебедев В.Г. О перераспределения примеси на границах фаз растворов	140
Камильянова А.А., Лебедев В.Г., Ладьянов В.И. Макроскопическая модель сегрегации примеси в бинарных растворах	142
Русаков К.А., Кондрашов Е.Н., Ледер М.О. Проявления ликвационных эффектов в титановых слитках ВДП	144
Лебедева А.А., Лебедев В.Г., Галенко П.К. Предел резкой границы для ИСМ-модели в концентрированных растворах	145
Обухов А.А., Лебедев В.Г. Численный алгоритм моделирования уравнений ИСМ-модели фазового поля	148
Ворошилов Е.С., Мосина Р.М., Кривилев М.Д. Математическое моделирование консолидации порошка 03X17N14M2 (316L) при лазерном сплавлении	150
Мосина Р.М., Гильмутдинов В.Ф., Кузьмин И.М. Расчёт эффективных теплофизических и механических свойств сплавов 03X17N14M2 и ВТ6 на основе метода пространственного осреднения	153
Камаева Л.В., Суслов А.А., Баталова Е.А., Шутов И.В., Бражкин В.В. Особенности кристаллизации сплавов Al-Cu-Fe при давлении 5ГПа	155
Кондратьев Н.С., Трусов П.В., Подсердцев А.Н., Макаревич Е.С., Няшина Н.Д. Описание эволюции зеренной структуры в результате динамической рекристаллизации с применением расширенной многоуровневой статистической модели	156
Корнева М.А., Жияев П.А. Исследование процесса роста зерен в Ni-Cu сплавах методом молекулярной динамики	157
Байкузин И.И., Салтыков И.Р., Шутов И.В. Сравнительный анализ влияния концентрации Zn на структурообразование при контактном сплавлении припоя Zn-Al со сплавом АМг	159

Коробейников С.А., Лебедев В.Г., Ладьянов В.И. О фазово-полевом описании формирования стехиометрических фаз в бинарном растворе на мезоскопических масштабах	160
Салтыков И.Р., Байкузин И.И., Шутов И.В. Исследование структурно-фазовых характеристик зоны контактного сплавления припоя Zn-Cu-Al с подложкой АМгЗ	162
Сапегина И.В., Лубнин А.Н., Ладьянов В.И. Структура и свойства литых сплавов Nb-5мас%Si-x мас%Al (x=1, 3).....	164
Дуб В.С., Тохтамышев А.Н., Толстых Д.С., Мальгинов А.Н., Руцкий Д.В., Косырев К.Л., Иванов И.А., Дуб В.А. Влияние примесей и теплофизических условий затвердевания на литую структуру конструкционных сталей.....	165

Секция III: Междисциплинарные вопросы.

Скоростное затвердевание. Аддитивные технологии.	169
Мажукин В.И., Шапранов А.В., Демин М.М. Континуальная модель гомогенного плавления металлов.....	171
Makarov A.V., Sirosh V.A., Kharanzhevskiy E.V., Volkova E.G., Soboleva N.N., Gaviko V.S. Effect of nanoscale inclusions in amorphous boron-based ceramic coatings formed by high-speed solidification of ceramic melt during short-pulse laser deposition on abrasive wear resistance	172
Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Svec Sr. D., Janickovic D. Особенности подготовки расплавов Al-Ni-Co-R к быстрой закалке	175
Бельтюков А.Л., Меньшикова С.Г., Ладьянов В.И. Роль редкоземельных металлов в возникновении релаксационных процессов в расплавах Al-PM-РЗМ.....	176
Черепанов А.Н., Черепанова В.К., Бублик В.В. Влияние нанодисперсных порошков на растекание и кристаллизацию металлической капли на пористой подложке.....	178
Мажукин А.В., Шапранов А.А., Мажукин В.И., Королева О.Н. Кинетические стадии кристаллизации/плавления сильно переохлажденных/перегретых гранецентрированных и объемноцентрированных кубических металлов. Атомистическое моделирование	181
Крюкова О.Н., Князева А.Г. Двухуровневая модель управляемого синтеза композита на подложке	183
Букрина Н.В., Князева А.Г. Модель синтеза интерметаллидного композита из порошковой прессовки смеси Ni и Ti в режиме теплового взрыва	185
Назаренко Н.Н., Князева А.Г. Оценка напряжений в цилиндрическом образце с покрытием при кратковременном тепловом воздействии.....	187

Международная конференция

Васильев С.В., Свиридова Е.А., Ткач В.И. Влияние нестационарного характера процесса зарождения на термическую устойчивость аморфного состояния в сплаве Fe48Co32P14B6	190
Еремина М.А., Ломаева С.Ф., Харанжевский Е.В., Бельтюков А.Н. Высокоскоростное селективное лазерное спекание механосплавленных порошков W-Fe: фазовый состав, микроструктура и свойства износостойких покрытий	193
Харанжевский Е.В., Ипатов А.Г., Писарева Т.А. Структура и механические свойства сплавов Ni-ZrO ₂ , полученных высокоскоростным затвердеванием сильноперегретого расплава	195
Неульбин С.Д., Щицын Ю.Д., Овчинников И.П., Юрченко А.Н., Мосягин И.А. К вопросу о снижении дефектности и повышении качества заготовок из алюминиевых сплавов при аддитивном формировании	196
Черепанов А.Н., Дроздов В.О., Филиппов А.А. Влияние наночастиц TiN на структуру и механические свойства лазерного соединения пористой стали с монолитной	198
Елькин И.А., Барышев О.Б., Бельтюков А.Н., Чулкина А.А. Получение анодов Ta конденсаторов с помощью электроимпульсного спекания	200
Долгушева Е.Б. Молекулярно-динамический расчет решеточной теплопроводности ГЦК Ti и Zr	202
Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхина О.Ю., Сидоренко А.С. Оценка влияния дефектов структуры на магнитные свойства нанопленок спинтроники	205
Цыганков А.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В. Формирование пористой структуры в аморфном никелиде титана	208
Иванова П.А., Смирнова К.В., Иванов А.Н., Шутов Д.А., Рыбкин В.В. Некоторые закономерности образования твердой фазы в растворах нитратов железа и кобальта под действием тлеющего разряда	209
Васильев С.В., Свиридова Е.А., Ткач В.И. Количественное описание кинетики неизотермической кристаллизации металлического стекла Fe48Co32P14B6	212
Ломаев С.Л., Гордеев Г.А., Кривилев М.Д. Воздействие ультразвуковой кавитации на процесс кристаллизации при лазерной обработке металлических образцов	215
Menshikova S.G., Afkalkikova V.Yu., Vasin M.G., Ohara K. High-energy X-ray diffraction study of Al70Cu30 and Al90Y10 liquid alloys	218
Гавриленко О.О., Кривилев М.Д., Харанжевский Е.В. Анализ трещинообразования на микроуровне для композиционных покрытий на основе карбида и нитрида бора	220

Международная конференция

Душина А.Ю., Ольшанская Т.В. Закономерности процессов кристаллизации при многослойной проволочной наплавке стали 308LSi высококонцентрированным источником энергии.....	222
Иванов И.А., Юдин А.В., Жармухамбетов А.С., Бубнёнков Б.Б. Оценка влияния параметров СЛС на структуру и свойства стали 08X18H10T с помощью системы контроля температуры области сплавления (СКТОС)	225
Королева О.Н., Демин М.М., Мажукин В.И., Алексашкина А.А. Неравновесные характеристики теплообмена меди в области фазового перехода плавление-кристаллизация.....	227
Макаров А.В., Степченков А.К., Соболева Н.Н., Вопнерук А.А., Котельников А.Б., Коробов Ю.С. Влияние отжига на структуру и микромеханические характеристики NiBSi/WC и NiBSi/Cr покрытий, сформированных высокоскоростным газопламенным напылением.....	229
Пермяков Г.Л., Ольшанская Т.В. Исследование влияния стратегии аддитивного выращивания на анизотропию механических свойств заготовок из алюминиевых сплавов.....	232
Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Svec P., Svec Sr. P., Janickovic D. Особенности кристаллизации аморфных сплавов Al-Ni-Co-R (R = Nd,Sm,Gd,Tb,Yb)	235
Бельтюков А.Л., Мороз А.И., Русанов Б.А., Сидоров В.Е., Ладьянов В.И. Вязкость стеклообразующих сплавов Al-Ni-Co-Tb.....	237
Степченков А.К., Макаров А.В., Харанжевский Е.В., Коробов Ю.С., Окулов А.В., Завалишин В.А., Гохфельд Н.В. Микромеханические свойства наплавленных импульсным лазером CrFeNi покрытий, легированных карбидом бора В4С.....	238
Фатталова Д.Р., Ломае С.Л. Влияние термодинамического фактора на условия ультразвуковой кавитации парогазовых пузырьков при лазерной обработке металлических образцов	241
Хазияхметов Р.Т. Сопоставление методов предобуславливания	243
Shutov D.A., Smirnova K.V., Ivanov A.N., Rybkin V.V. Plasma-solution synthesis of zinc oxide doped with cadmium	246
Оглавление.....	249