



**Казанский федеральный
УНИВЕРСИТЕТ**

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

**V ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ШКОЛЫ-
КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ**

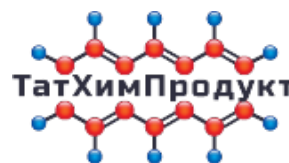
«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



Координационный совет по делам молодежи в
научной и образовательной сферах при Совете
при Президенте Российской Федерации по
науке и образованию

ДИА-М
современная лаборатория

www.dia-m.ru
заказ on-line



Казань, 30 ноября-2 декабря 2022 года

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

V ВСЕРОССИЙСКОЙ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ ШКОЛЫ-
КОНФЕРЕНЦИИ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ
УЧЕНЫХ

«МАТЕРИАЛЫ И ТЕХНОЛОГИИ XXI ВЕКА»



Сборник Тезисов V Всероссийской с международным участием школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Материалы и технологии XXI века» / Отв. ред. А.В. Герасимов. [Электронный ресурс] – Казань.: КФУ, 2022. – 1 USB-flash-накопитель. – Систем. требования: ПК с процессором с тактовой частотой не менее 2 ГГц; Windows 8; USB 2.0; Adobe Acrobat Reader.

Казань, 30 ноября-2 декабря 2022 года

Организатор

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Организационный комитет

Председатель организационного комитета:

Таюрский Д.А., первый проректор – проректор по научной деятельности КФУ.

Со-председатели и координаторы организационного комитета:

Абрамский М.М., директор Института информационных технологий и интеллектуальных систем КФУ;

Гафуров М.Р., директор Института физики КФУ;

Зиганшин М.А., директор Химического института им. А.М. Бутлерова КФУ;

Киясов А.П., директор Института фундаментальной медицины и биологии КФУ, проректор по биомедицинскому направлению;

Нургалиев Д.К., директор Института геологии и нефтегазовых технологий КФУ, проректор по направлениям нефтегазовых технологий, природопользования и наук о Земле;

Чикрин Д.Е., директор Института вычислительной математики и информационных технологий КФУ.

Члены организационного комитета:

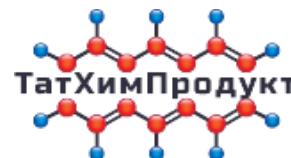
Абгарян Г.В.
Билялов А.И.
Валиев И.Ф.
Валиева Л.Р.
Варфоломеев М.А.
Вахитов И.Р.
Галиханова У.А.
Герасимов А.В.

Дьяконова Т.В.
Ильин А.В.
Каюмов А.Р.
Кольчугин А.Н.
Райманова М.А.
Хайдаров А.А.
Челнокова И.А.

Партнеры конференции



Координационный совет по делам молодежи в научной и образовательной сферах при Совете при Президенте Российской Федерации по науке и образованию



СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1 МЕДИЦИНА.....	5
СЕКЦИЯ 2 БИОТЕХНОЛОГИЯ.....	63
СЕКЦИЯ 3 ХИМИЯ.....	87
СЕКЦИЯ 4 ЭНЕРГЕТИКА.....	245
СЕКЦИЯ 5 СОВРЕМЕННЫЕ IT-ТЕХНОЛОГИИ, РОБОТОТЕХНИКА И ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.....	255
СЕКЦИЯ 6 ДИЗАЙН, СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ, МЕЗО- И НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ.....	270

ИЗМЕНЕНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ОЦК-КРИСТАЛЛА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ

А.Н. Гостевская^а, А.В. Маркидонов^б

^а Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

^б Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, Новокузнецк, Россия

lokon1296@mail.ru

В ходе процесса термического воздействия необходимо понимать следующее: данным процессом является изменение микроструктуры металла, при воздействии на него температурны, в результате чего формируются физико-химические свойств металла [1]. Метод компьютерного моделирования дает возможность виртуального проведения эксперимента, при котором возможно не только создавать, но и развивать сложную систему в виртуальной среде без затрат.

В прямоугольной системе координат размер вычислительной единицы находится в трех ортогональных кристаллографических направлениях, совпадающих с осью. Далее формируется базовая ячейка, формируется массив частиц, соответствующий ОЦК-решетке, и его трансляция заполняет весь заданный объем. В данном исследовании функция межатомного взаимодействия применялся потенциал. Расчеты выполняются в пакете XMD и визуализировались с помощью пакета визуализации OVITO [2].

Процесс моделирования состоял из двух этапов. На начальном этапе расчетная ячейка подвергалась неравномерному нагреву в течение 10 пс модельного времени. После чего следовал второй этап, заключающийся в неравномерном охлаждении в течение 20 пс, при котором температура расчетной ячейки. После того как локальная температура расчетной ячейки на этапе нагрева начинает превышать температуру плавления происходит фазовый переход и в ячейке формируется граница раздела твердой и жидкой фазы. Последующее повышение температуры приводит к, отслоению частиц. Этап охлаждения сопровождается локализацией областей разряджения, сформированных на предыдущем этапе нагрева, их коалесценцией и образованием сферических пор. Следует отметить, что пустоты, образовавшиеся в ячейках при моделировании, исчезают при $q \leq 3,5$ МВт/см². Такого рода недостатки подлежат дальнейшему проведению исследований.

Быстропротекающие процессы в твердых телах на сегодняшний день успешно изучаются с помощью методов компьютерного моделирования. Было обнаружено, что в поверхностном слое после прекращения внешнего воздействия свободный объем локализуется в виде группы пор, которые растворяются в процессе усадки. Стабилизировать данные поры можно путем увеличения скорости охлаждения расчетной ячейки.

Работа выполнена в рамках государственного задания: 0809-2021-0013.

1. Маркидонов А.В., Гостевская А.Н., Громов В.Е., Старостенков М.Д., Зыков П.А. Моделирование структурных изменений в поверхностном слое деформированного ОЦК-кристалла при кратковременном внешнем высокоинтенсивном воздействии // Деформация и разрушение материалов. 2022. № 8. С. 2-8.
2. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation Materials Science and Engineering. 2010. V.18. 015012.