

ВЛИЯНИЕ МЕЖАТОМНОГО ПРИТЯЖЕНИЯ НА УСТОЙЧИВОСТЬ ПЕРЕГРЕТОГО КРИСТАЛЛА

Куксин А.Ю., Стегайлов В.В.

*МФТИ, Долгопрудный, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва
stegailov@ihed.ras.ru*

В работе [1] была получена оценка параметров спинодали для систем мягких сфер по термодинамическому критерию устойчивости $(\partial P/\partial V)_T = 0$. В работах [2, 3] устойчивость данной модели исследовалась также по температурной зависимости модулей упругости твердого тела (механический критерий) и по зависимости частоты нуклеации жидкой фазы от перегрева (кинетический критерий устойчивости). Было показано, что в пределах точности расчета три указанные критерия эквивалентны.

Кроме того, в работе [2] (на основе численных данных [4] по описанию УРС жидких металлов в рамках модели мягких сфер) проведен расчет спинодали меди. Показано, что для адекватного описания линии плавления и спинодали при давлениях $P < 10$ ГПа необходимо учитывать электронную составляющую, что эквивалентно введению эффективного межатомного притяжения, понижающего энергию системы.

В данной работе проведен расчет границы устойчивости для системы частиц с межатомным притяжением по различным критериям. Проведено сравнение полученных результатов с [1–3].

Расчеты проводились методом молекулярной динамики. В рамках этого метода классические уравнения движения для системы N частиц, упорядоченной в g_{111} кристалл, интегрировались численно при заданном потенциале взаимодействия. Были рассмотрены два случая: чисто отталкивательный потенциал и потенциал с притяжением (потенциал Леннарда–Джонса с радиусами обрезки $2^{1/6}\sigma$ и 2.5σ). В отличие от [3], для формирования исходных конфигураций системы частиц, соответствующих перегретому метастабильному кристаллу, использовался метод искусственного удержания частиц в ячейках.

1. Кривогуз М.Н., Норман Г.Э. // ДАН. 2001. Т.379. №2. С.177–180.
2. Кривогуз М.Н., Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // Научные труды ИТЭС ОИВТ РАН. М., 2001. С.145–150.
3. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // ДАН. 2002. Т.376. №3. С.328–332.
4. Левашов П.Р. Препринт ОИВТ РАН №1–446. М., 2000.