

ОСОБЕННОСТЬ ДВУХЧАСТИЧНОГО КОРРЕЛЯТОРА В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА РАСПЛАВА ЧИСТОГО МЕТАЛЛА

Норман Г.Э.^{1,2} Писарев В.В.^{1,2} Флейта Д.Ю.^{1,2}*

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²МФТИ, Долгопрудный, Россия

*fleyta.du@phystech.edu

Точка фазового перехода в веществе, несмотря на её исключительное влияние на поведение вещества, не является особенной для его термодинамических функций [1, 2].

В работе показано, что определенные двухчастичные корреляторы движения для систем расплавов чистых металлов, моделируемых с помощью метода молекулярной динамики, имеют особенности в окрестности точки фазового перехода. Временное поведение корреляторов движения, подобных описанным в работе [3], различно в стабильной жидкой и переохлажденной метастабильной фазе расплава для ряда исследуемых металлов. Дана физическая интерпретация таких пространственных корреляций дальнего порядка в метастабильных системах. Приводятся зависимости корреляционных функций в зависимости от скорости охлаждения, а также сорта и количества атомов в системе.

Данная работа была осуществлена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых ученых МК-1404.2017.8.

-
1. Андреев А. Ф., // ЖЭТФ 1963, Т. 64. No. 6. С. 2064.
 2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика, Москва (1976), С. 284.
 3. Волошин В. П., Маленков Г.Г., Наберухин И. Ю., //Журн. структ. химии, Т. 54, No. 8. С. 239.