

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ В УСЛОВИЯХ ИМПУЛЬСНОГО НАГРЕВА

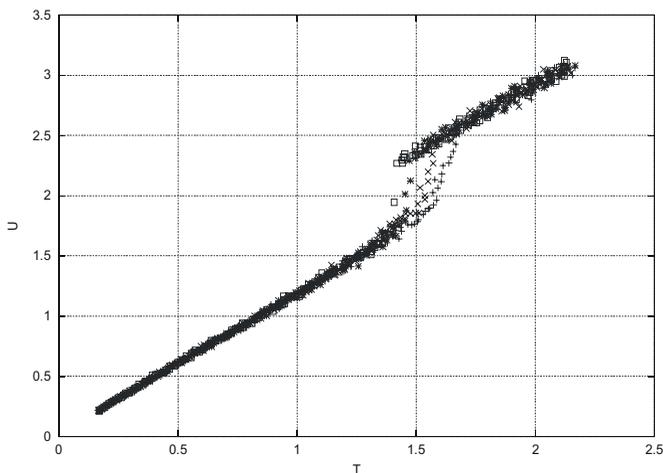
Стегайлов В.В.

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

В работах [1, 2] содержатся результаты моделирования процесса плавления перегретого кристалла мягких сфер методом молекулярной динамики (МД). При этом рассматривалась ситуация *самопроизвольного* плавления (разупорядочивания) метастабильной упорядоченной конфигурации частиц. С точки зрения эксперимента интерес представляет случай плавления в условиях нагрева, например, так бывает при импульсных электровзрывах металлических микропроволочек, при характерных временах энерговыклада ~ 30 нс [3].

В данной работе представлены результаты МД моделирования плавления *гцк* кристалла при нагреве с постоянной скоростью dT/dt .

На приведенном для иллюстрации графике зависимости средней потенциальной энергии взаимодействия на частицу U от температуры частиц T представлены случаи $dT/dt = 0.04$ (+), 0.02 (x), 0.005 (♠), 0.00125 (♣) (усл. ед.). Характерный скачок соответствует моменту перехода системы в жидкую фазу. Уменьшение скорости нагрева приводит к уменьшению предельной температуры существования твердой фазы.



1. Кривогуз М.Н., Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // Научные труды ИТЭС ОИВТ РАН. М., 2001. С.145–156.
2. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. // ДАН. 2002. Т.376. №3. С.328–333.
3. Sarkisov G.S., Bauer B.S., De Groot J.S. // JETP Letters. 2001. V.73. №2. P.69–74.