

# Распад метастабильного кристалла: молекулярно-динамический анализ\*

А.О. Типеев, В.Г. Байдаков

ФГБУН Институт теплофизики УрО РАН

На суперкомпьютерах гибридного типа с использованием метода молекулярной динамики исследована кинетика спонтанного распада леннард-джонсовского кристалла. Моделирование проводилось в свободно распространяемой распараллеленной программе LAMMPS [1], на суперкомпьютерах «Уран» Института математики и механики УрО РАН и «МВС-100К» Межведомственного Суперкомпьютерного Центра РАН. Параллельные вычисления реализованы с использованием до 160 центральных и 8 графических процессоров.

Расчеты проведены в  $NVE$  ансамбле в системах, содержащих от  $N = 2\,048$  до  $500\,000$  частиц (гранецентрированная кубическая решетка) при пяти значениях приведенных температур  $T^* = k_B T / \varepsilon = 0.3; 0.4; 0.55; 0.7; 0.85$ , первые четыре из которых относятся к области отрицательных давлений. Заход в метастабильную область производился путем изменения плотности системы (линейного растяжения ячейки). Было смоделировано более 5000 событий плавления.

При  $T^* > 0.4$  распад регулярной структуры происходил в области состояний, где производная  $(\partial p / \partial \rho)_T > 0$ , а при более низких температурах – вблизи плотности, где  $(\partial p / \partial \rho)_T = 0$  и в области, где  $(\partial p / \partial \rho)_T < 0$ . Во всех случаях разрушение кристалла происходило по активационному механизму, посредством зарождения и роста конкурирующей фазы. До- и закритические зародыши жидкой и газовой фазы имели форму, близкую к сферической, а распределение времен ожидания критического зародыша, при фиксированных  $p$  и  $T$ , удовлетворяло распределению Пуассона.

Методом среднего времени жизни [2] рассчитана частота нуклеации в интервале от  $10^{30}$  до  $10^{35} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$  и определена ее плотностная зависимость. Выявлена зависимость частоты нуклеации от числа частиц в системе. С возрастанием  $N$  от  $2\,048$  до  $108\,000$  частота нуклеации изменялась в 25-30 раз при  $T^* = 0.85$  и в 5-6 раз при  $T^* = 0.4$ . Наиболее сильные изменения происходили в интервале  $N = 2\,048 - 8788$ .

При  $T^* \geq 0.55$  разрушение кристаллического порядка начиналось с образования зародыша жидкой фазы и сопровождалось понижением температуры и ростом давления. При  $T^* < 0.55$  в кристалле происходила кавитация. Появление кавитационной полости приводило к росту температуры и давления в системе.

Предложена методика анализа формы зародышей образующихся фаз, основанная на параметре центросимметрии [3].

Исследована устойчивость перегретого кристалла относительно сдвиговых и объемных напряжений. Рассчитан тензор изотермических модулей упругости и изотермических модулей упругой жесткости.

Процесс распада кристалла визуализирован.

## Литература

1. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. March 1995. Vol. 117, No 1. P. 1-19. (URL: <http://lammmps.sandia.gov>)
2. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. — М.: Наука, 1972. — 312 с.
3. Kelchner C., Plimpton S., Hamilton J. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // Phys. Rev. B. 1998. Vol. 58, No 11085.

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 14-19-00567)