

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СИСТЕМ

Студент гр.11304120 Скуратович А.А.

Кандидат техн. наук, доцент Колонтаева Т.В.

Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь

Целью данной работы является изучение метастабильных фаз с помощью методов молекулярно-динамического моделирования.

В данной работе проведен критический обзор литературных источников в области изучения метастабильных систем и областей их применения в приборостроении.

В результате обзора установлено, что существуют следующие виды метастабильных систем: перегретая жидкость, переохлажденная жидкость, перегретый кристалл, переохлажденный пар.

Метастабильное состояние представляет собой минимум термодинамического потенциала системы при известных внешних параметрах. Переход из одной фазы в другую заставляет преодолевать барьер энергетически невыгодных промежуточных состояний. Системы с большой вязкостью, могут длительное время находиться в метастабильном состоянии. При медленном падении температуры в метастабильной области возможен полный или частичный распад расплава.

Метастабильное состояние есть ни что иное как нахождение системы в состоянии неполного равновесия, при заданных внешних параметрах, а также соответствующее хотя бы одному из минимумов ее термодинамического потенциала.

Существование и появление метастабильного состояния основано на медленном процессе фазового перехода первого рода. Как известно, началом фазового перехода является образование в исходной гомогенной фазе отдельных незначительных объемов, имеющих другой состав и структуру. Во всем объеме системы рост микрообъемов невозможен, так как фазовый переход имеет прерывистый характер.

Переходом из метастабильного состояния в стабильное называют образование микрообъемов новой фазы в старой фазе.

После флуктуации в кристалле одинаковые кластеры соединяются и из них формируются зародыши новой фазы: происходит обратный переход системы из метастабильного состояния в стабильное. Распад метастабильного состояния происходит из-за несовместимости новой образованной структуры кристаллической фазы со структурой минерала-хозяина.

Так же в результате работы были подробно изучены вопросы, такие как критический размер зародыша и его влияния на метастабильные системы, процессы возникновения новых фаз, расплавы и их распады, кристаллизация.

Особое внимание при выполнении данной работы уделено изучению метастабильного состояния стеклообразных материалов. Метастабильность достигается за счет резкого охлаждения расплава стекла с последующим формованием изделий.

Современным направлением изучения метастабильных систем является метод молекулярно-динамического моделирования, позволяющий находить свойства метастабильных фаз, и исследовать фазовую метастабильность. Используя данный метод, можно описать свойства границ раздела фаз, находящихся в равновесии в плоском пределе. Так же данный метод используется для работы с моделями, в которых содержатся большое количество частиц, взаимодействующих друг с другом.

Литература

1. Соболев Р.Н. Метастабильное состояние магматических систем / Р.Н. Соболев // Бюллетень Московского общества испытателей природы. Отдел геологический. – 2017. – Т. 92. – №. 2. – С. 83–89.
2. Проценко, С. П. Молекулярно-динамическое моделирование метастабильных фазовых состояний. Термодинамические свойства леннард-джонсовской системы / С.П. Проценко, В.Г. Байдаков, З.Р. Козлова // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. – 2014. – Т. 18. – №. 1 (62). – С. 214–223.