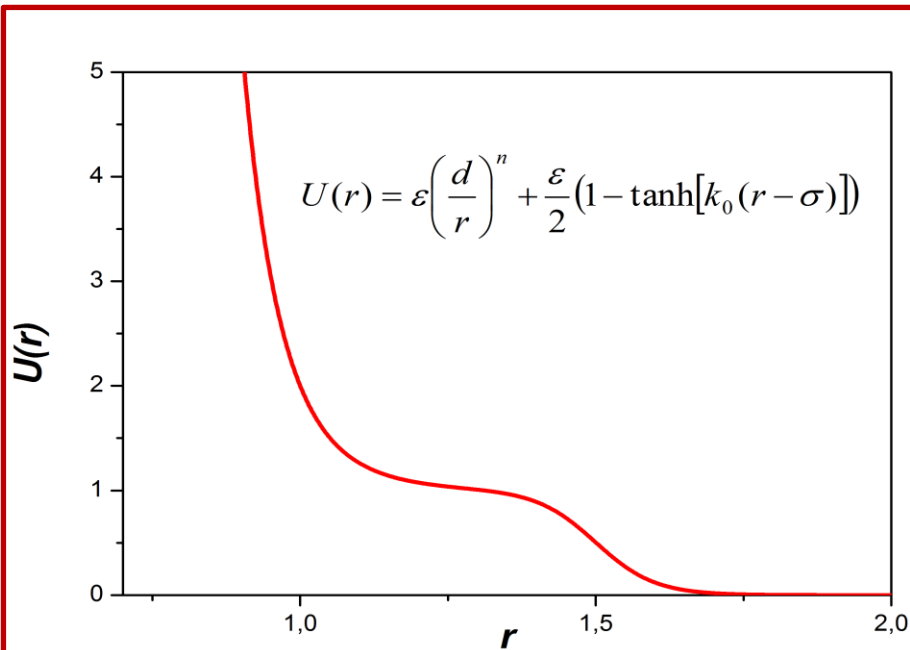
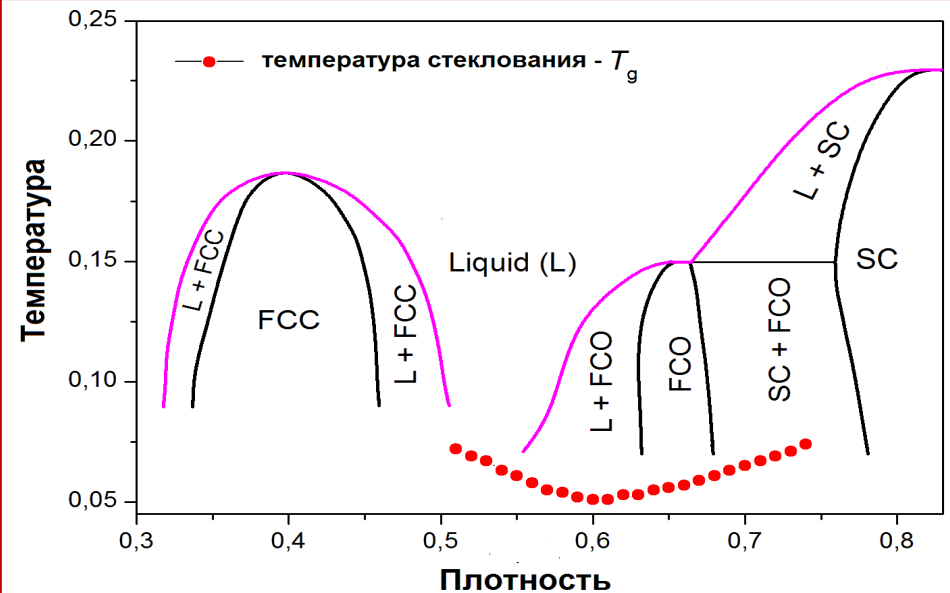


# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТЕКЛОВАНИЯ В СИСТЕМЕ КОЛЛАПСИРУЮЩИХ СФЕР

Проведено компьютерное моделирование структурных и динамических свойств системы коллапсирующих сфер, описываемых эффективным парным потенциалом с отрицательной кривизной в области отталкивания. Такие потенциалы используются в качестве простейших моделей систем с направленными связями типа воды, кремнезема и др. Впервые для однокомпонентных систем с изотропными потенциалами обнаружено стеклование при квазиравновесном охлаждении, сопровождающееся рекордно большими отклонениями температурных зависимостей транспортных коэффициентов от закона Аррениуса. Найденная зависимость температуры стеклования от плотности имеет аномальный немонотонный характер, что объясняется квазибинарным поведением системы. Полученные результаты дают существенный вклад в развитие общей теории стеклования, которая является фундаментальной основой для технологий изготовления аморфных сплавов и композитных нанокристаллических материалов с заданными свойствами.



Потенциал системы коллапсирующих сфер



Зависимость температуры стеклования от плотности и равновесная фазовая диаграмма для системы коллапсирующих сфер. Температура и плотность выражены в безразмерных леннард-джонсовских единицах.