

УДК 538.93

Вязкость расплава алюминия при стекловании по данным молекулярной динамики

Е.М. Кирова^{1,2}, В.В.Писарев²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН

В работе проведено исследование поведения коэффициента кинематической вязкости в процессе стеклования методом молекулярной динамики [1].

Для расчета сдвиговой вязкости η использовалась формула Грина-Кубо:

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^{\infty} dt \langle P_{xy}(0) \cdot P_{xy}(t) \rangle,$$

где V – объем системы, T – температура, угловые скобки означают усреднение по ансамблю, $\langle \dots \rangle$ – усреднение по ансамблю, P_{xy} – сдвиговое напряжение.

При моделировании процесса изобарного охлаждения расплава алюминия использован потенциал погруженного атома [2]. В исходной конфигурации атомы располагались в половине объема расчетной ячейки в виде пленки, параллельной плоскости XY . Получена зависимость коэффициента кинематической вязкости от температуры при различных скоростях охлаждения в интервале температур 300-950 К.

В ходе работы обнаружены две различные температуры переходов. Первая соответствует переходу к колебательному виду автокорреляционных функций (АКФ) сдвиговых напряжений P_{xz} и P_{yz} , содержащих компоненты вдоль выделенного направления Z (рис.1). АКФ сдвигового напряжения P_{xy} при этой температуре перестает сходиться к нулю при $t \rightarrow \infty$, что соответствует сохранению ненулевого сдвигового напряжения. Подобное поведение характерно для твердых тел (рис.2). Вторая характеризуется «заморозкой» автокоррелятора, т.е. сохранением сдвигового напряжения в плоскости пленки. Было проведено сравнение полученных результатов с другими численными экспериментами [3]. Также для температуры выше температуры стеклования было проведено сравнение кинематической вязкости с экспериментальными данными [4].

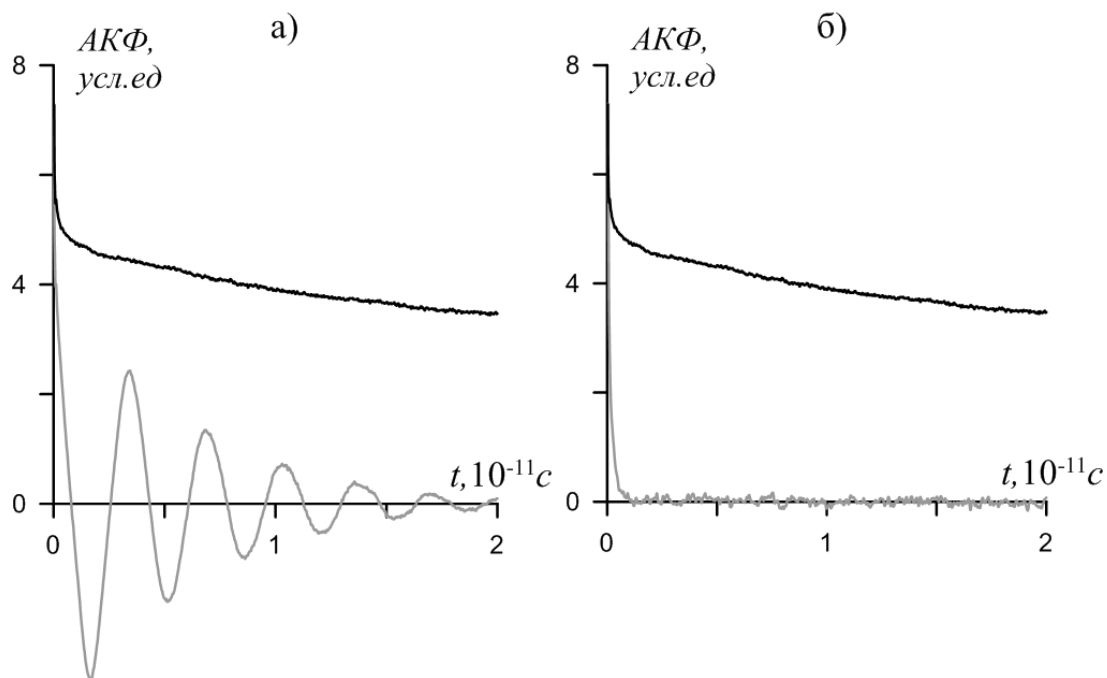


Рис.1а) АКФ сдвигового напряжения P_{xy} (черным), P_{xz} и P_{yz} (серый) при 500 К.
 б) АКФ сдвигового напряжения P_{xy} для различных температур: 500 К (черным), 950 К (серым).

Выражаем благодарность Норману Г.Э. за предложенную тему, а также Бельтюкову А.Л. за предоставленные экспериментальные данные. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-01-12070 офи-м, 14-08-31587_мол_а и программой №43 фундаментальных исследований Президиума РАН.

Литература

1. *Rapaport D.C.* The Art of Molecular Dynamics Simulations. – Cambridge University Press Cambridge, 2005. – 549 с.
2. *Daw, Murray S., Baskes M.* Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. – Phys.Rev.B –1984. –V.29. – P.6443-6453.
3. *Kolotova L.N., Norman G.E., Pisarev V.V.* Glass transition of aluminium melt. Molecular dynamics study. – J. Non-Cryst. Solids. – 2015. – V. 429. – P. 98-103.
4. *Bel'tyukov A.L., Menshikova S.G., Lad'yanov V.I.* The viscosity of binary Al-Fe melts in the Al-rich area. – J. Non-Cryst. Solids. – 2015. – V. 410. – P. 1-6.

