

Член-корреспондент АН СССР Н. А. ВАТОЛИН, И. Т. СРЫВАЛИН,
А. М. ЕВСЕЕВ, В. А. ПОЛУХИН, Б. Р. ГЕЛЬЧИНСКИЙ,
В. Ф. УХОВ, О. А. ЕСИН

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЖИДКИХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Методом молекулярной динамики на ЭВМ БЭСМ-6 исследовалась модель жидких металлов Al, Fe, Ni и эквимольных расплавов Al—Mg, Al—Zn, Fe—Ni при различных температурах. Интегрирование уравнений движения проводилось для системы из 256 частиц с шагом интегрирования 10^{-14} — 10^{-15} сек. Длина ребра базовой ячейки выбиралась в соответствии с плотностью исследуемого металла или сплава при заданной температуре. Метод молекулярной динамики достаточно полно описан в (1, 2).

Потенциал межчастичного взаимодействия для Fe и Ni рассчитывали из рентгеноструктурных данных по методу Борна—Грина и Перкуса—Йевики. Для сплава Fe—Ni потенциал рассчитали по предложенному ранее выражению (3). Для сплавов Al—Mg и Al—Zn потенциал взаимодействия рассчитали по методу псевдопотенциалов, используя версию Краско—Гурского (4). На рис. 1 приведены кривые потенциалов для чистого Al, рассчитанные различными методами. На рис. 2 приведены функции радиального распределения $g(r)$, рассчитанные методом молекулярной динамики из различных потенциалов и по рентгеноструктурным данным. По-видимому, характер осцилляций потенциалов мало влияет на вид $g(r)$, а

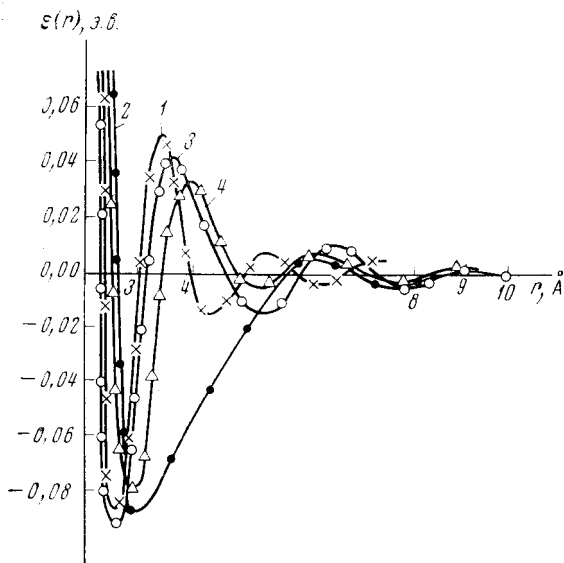


Рис. 1. Кривые потенциалов межчастичного взаимодействия жидкого Al: 1 — $\epsilon(r)$ расчет (5); 2 — $\epsilon(r)$ расчет по версии Краско-Гурского; 3 — $\epsilon(r)$ расчет из рентгеноструктурных данных по теории Борна—Грина — Боголюбова; 4 — $\epsilon(r)$ расчет из $g(r)$ (рис. 2) по теории Перкуса—Йевики

определяющим является положение и величина главного минимума потенциала. При разогреве модели от начального состояния, когда частицы разбросаны в решетку (г.ц.к.) при $T=100^\circ\text{K}$ (система Al—Zn) наблюдались изменения значений $g(r)$ от 21—32, при низких температурах, до 2,5—3 при температурах, соответствующих жидкому состоянию, а при температурах испарения системы значения $g(r)$ практически не отличались от единицы,

т. е., по-видимому, наблюдались фазовые переходы твердое — жидкое — газ. Постепенное охлаждение системы от температуры плавления до 100°K за 10000 шагов, что составляет реальный временной интервал 10^{-10} сек., показало, что $g(r)$ изменились незначительно (в 2 раза). По-видимому, для получения фазового перехода жидкое — твердое методом молекулярной динамики необходимо большее число частиц и более медленное охлаждение.

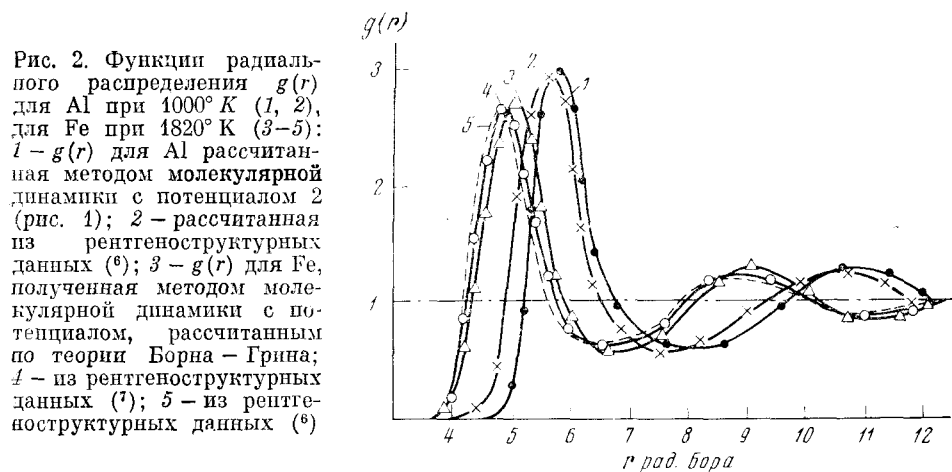


Рис. 2. Функции радиального распределения $g(r)$ для Al при 1000°K (1, 2), для Fe при 1820°K (3–5): 1 — $g(r)$ для Al рассчитанная методом молекулярной динамики с потенциалом 2 (рис. 1); 2 — рассчитанная из рентгеноструктурных данных (6); 3 — $g(r)$ для Fe, полученная методом молекулярной динамики с потенциалом, рассчитанным по теории Борна — Грина; 4 — из рентгеноструктурных данных (7); 5 — из рентгеноструктурных данных (6)

В результате молекулярно-динамического расчета системы частиц с заданными температурой и объемом мы получаем все необходимые данные для расчета термодинамических и кинетических свойств: потенциальную и кинетическую энергии $g(r)$, автокорреляционные функции скорости, квадрат смещения. Для расчета термодинамических свойств использовались $g(r)$, усредненные по 2500–3000 шагов. Поверхностное натяжение (σ) и вязкость (η) металлов рассчитывали по известным выражениям метода коррелятивных функций

$$\sigma = \frac{\pi}{8} d_0^2 \int_0^\infty g(r) \frac{d\varepsilon(r)}{dr} r^4 dr, \quad (1)$$

$$\eta = \frac{2\pi}{15} \left(\frac{m}{kT} \right)^{1/2} d_0^2 \int_0^\infty g(r) \frac{d\varepsilon(r)}{dr} r^4 dr. \quad (2)$$

Лучшее согласие с экспериментом при расчете σ и η дает применение потенциалов, рассчитанных по теории Борна — Грина — Боголюбова. Для Fe при 1820°K вязкость по (2) составляет 0,038 пз, а эксперимент 0,046 пз. Для Al при 1000°K поверхностное натяжение по (1) 1150 дин/см, эксперимент 900 дин/см.

Зная внутреннюю энергию сплава и чистых металлов, рассчитали теплоту смешения. Для сплава Fe—Ni она составляет 0,7 ккал/г-ат, что характеризует его как близкий к идеальному, образующийся с небольшим поглощением тепла.

По Фурье-образу автокорреляционной функции скоростей, усредненной по 3000 шагов, и по квадрату смещения рассчитывали коэффициент диффузии. Оба способа дают практически одинаковые значения коэффициента диффузии и удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Для сплава Al—Mg расчет дает $6,2 \cdot 10^{-5}$, а эксперимент $7,5 \cdot 10^{-5}$ см²/сек. при $T=1000^\circ\text{K}$. Для сплавов Al—Mg и Al—Zn методом Займала по парциальным структурным факторам (рис. 3), рассчитали электросопротивление ρ . Для сплава Al—M электросопротивление, рассчитанное $49,6 \cdot 10^{-8}$, эксперимент $\sim 58 \cdot 10^{-8}$ ом·м.

При заданной структуре (г.д.к.) по автокорреляционной функции скоростей (при $T=100^\circ\text{K}$) были рассчитаны спектры колебания Al с потенциалами 2 и 3 (рис. 1) и для Ni с потенциалом, рассчитанным по теории Перкуса — Йефика. Спектры для Al удовлетворительно согласуются с литературными данными (³).

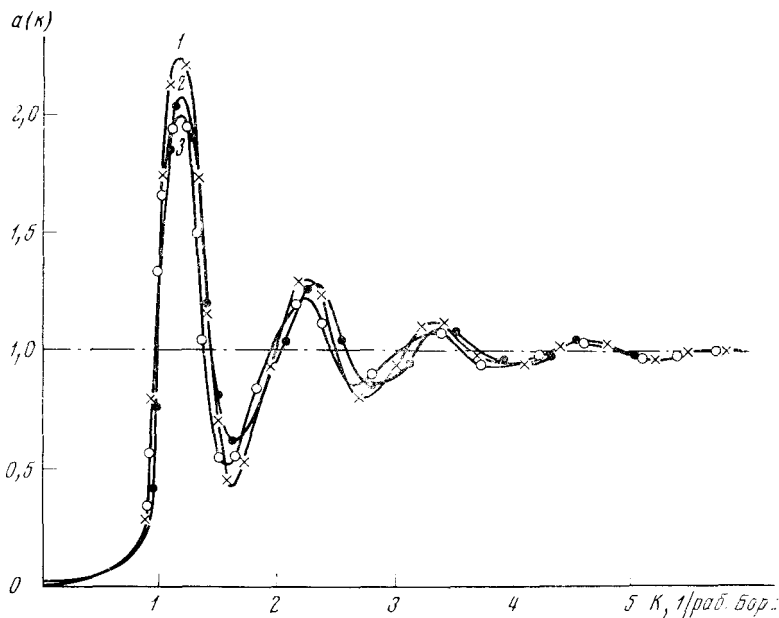


Рис. 3. Парциальные структурные факторы, рассчитанные для эквивалентного расплава Al — Mg при $T=1000^\circ\text{K}$. 1 — Al — Mg; 2 — Al — Al; 3 — Mg — Mg

По рассчитанным р.ф.р. восстанавливали потенциалы взаимодействия по теориям: Боголюбова — Борна — Грина, Ивона, Перкуса — Йефика, гиперцепной. Совпадение восстановленных с закладываемым потенциалами в метод молекулярной динамики было всегда удовлетворительным. Наилучшее согласие давала теория Боголюбова — Борна — Грина — Ивона.

Институт металлургии Уральского научного центра
Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
24 IX 1974

Краснодарский политехнический институт
Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ A. Rahman, Phys. Rev., v. A136, 405 (1964). ² А. М. Евсеев, М. Я. Френкель, А. И. Шинкарев, В сб.: Физика и физико-химия жидкостей, в. 1, М., 1972. ³ Н. А. Ваголин, В. Ф. Ухов, О. А. Есин, ДАН, т. 216, № 2 (1974). ⁴ Г. Л. Краско, З. А. Гурский, Письма в ЖЭТФ, т. 9, 10, 596 (1969). ⁵ У. Харрисон, Псевдопотенциалы в теории металлов, 1968. ⁶ У. Waseda, K. Suzuki, Phys. State Sol. (b), v. 57, 351 (1973). ⁷ А. А. Vatolin, E. A. Pastuchov, The IV Japan — USSR Joint Symposium of Physical Chemistry of Metallurgical Processes, The Iron and Steel Inst. of Japan, Tokyo, 1973.