

В. А. ПОЛУХИН, М. М. ДЗУГУТОВ, А. М. ЕВСЕЕВ, Б. Р. ГЕЛЬЧИНСКИЙ,
В. Ф. УХОВ, член-корреспондент АН СССР Н. А. ВАТОЛИН, О. А. ЕСИН

БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК И ХАРАКТЕР ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ В ЖИДКИХ МЕТАЛЛАХ

Методом машинного эксперимента ⁽¹⁾ исследовали сохранение ближнего порядка и характер движения атомов в жидком алюминии при 1000° К. В основной куб молекулярно-динамической модели с периодическими граничными условиями Борна — Кармана помещали 256 ионов с

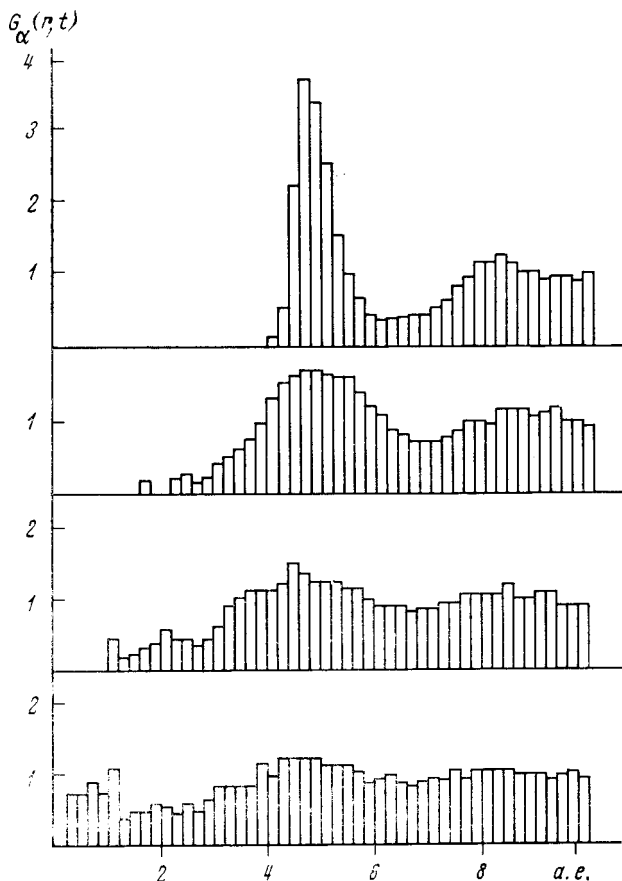


Рис. 1. Временная парная корреляционная функция Ван-Хова для Al при различных временах (с интервалом $4 \cdot 10^{-13}$ сек.)

заданными парными потенциалами взаимодействия. При этом использовали эффективные потенциалы, полученные ранее ⁽²⁾ методами Харрисона и Краско — Гурского.

Информацию о сохранении ближнего порядка в принятой модели получили с помощью зависящей от времени (t) парной корреляционной функции Ван-Хова

$$G_{\alpha}(r, t) = \Omega_0 [n(r, t) / 4\pi r^2 \Delta r]. \quad (1)$$

В ней $n(r, t)$ — число ионов, расположенных в момент времени t в интервале расстояний от r до $r+dr$, взятых от положения иона отсчета при $t=0$, Ω_0 — объем, приходящийся на один ион.

Как показывает рис. 1, на котором приведена функция $G_a(r, t)$ исследуемой модели в различные промежутки времени, ближний порядок сохраняется здесь по крайней мере в течение $1,6 \cdot 10^{-12}$ сек. За это время среднее смещение иона, как показывают вычисления, имеет порядок ра-

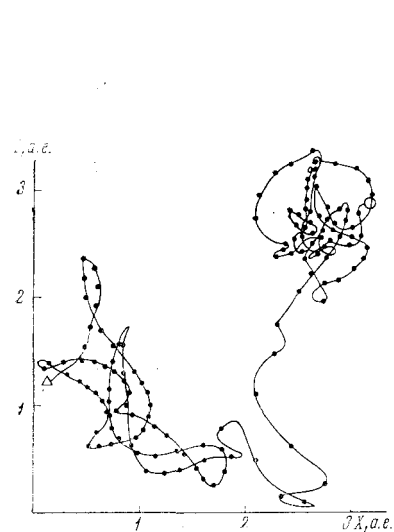


Рис. 2

Рис. 2. Проекция траектории движения отдельного иона Al на плоскость XOY при $T=1000^\circ\text{K}$ (густота точек свидетельствует об изменении скорости иона)

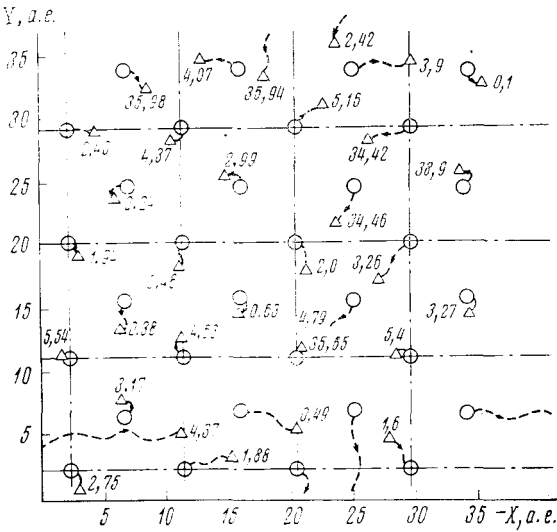


Рис. 3

Рис. 3. Движение 32 ионов жидкого Al ($T=1000^\circ\text{K}$) в плоскости $Z=2,25$ а.е. (цифры около конечных положений ионов характеризуют отклонение их от начального положения по Z)

диуса первой координационной сферы. Рассчитанная нами автокорреляционная функция скоростей $\langle v(0) \cdot v(t) \rangle$ меняет знак за 10^{-14} сек., что значительно меньше времени сохранения первой координационной сферы.

Изложенное позволяет заключить, что характер движения ионов в принятой модели сильно коррелирован и приводит к устойчивости локальной структуры.

Сказанное подтверждается также результатами наблюдений за движением как отдельного иона (рис. 2), так и их коллектива (рис. 3). Оказывается, что ион может находиться сравнительно большое время (10^{-12} сек.) в состоянии колебательного движения относительно почти неподвижного центра равновесия, а затем совершать быстрый переход к новому центральному колебанию (на рис. 2 последовательность точек, нанесенных с интервалом 10^{-15} сек., свидетельствует о характере изменения скорости).

По-видимому, колебательный характер движения иона обусловлен его участием в коллективном перемещении дрейфующей группы атомов. Этим, вероятно, объясняется длительное существование ближнего порядка в нашей модели. Таким образом, диффузия в жидких металлах складывается из медленного дрейфа иона в составе конгломерата атомов и быстрыми переходами его от одного конгломерата к другому.

Вычисленный нами по среднему квадрату смещения $\langle \Delta x^2 \rangle$ коэффициент (D) самодиффузии

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 6Dt + C \tag{2}$$

дает для потенциалов Харрисона и Краско — Гурского соответственно следующие значения: $4,9 \cdot 10^{-5}$ и $2,6 \cdot 10^{-5}$ см²·сек⁻¹; они не слишком отличаются от экспериментально найденных ⁽³⁾. Заметим, что и структурные факторы, рассчитанные ⁽²⁾ методом молекулярной динамики с применением тех же псевдопотенциалов, так же неплохо согласуются с опытными данными ⁽⁴⁾.

Таким образом, использованная нами модель удовлетворительно описывает динамику ионов жидкого алюминия и его структурные характеристики. Это позволяет надеяться, что полученные на основе такой модели выводы об устойчивости ближнего порядка, а также о существовании скачков иона наряду с медленным дрейфом его в окружении соседей отражает реальные процессы в жидком металле.

Институт металлургии
Уральского научного центра Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
8 IV 1975

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ А. М. Евсеев, М. Я. Френкель, А. И. Шинкарев, В сб.: Физика и физико-химия жидкостей, в. 1, М., 1972. ² Н. А. Ватолин, И. Т. Срывалин и др., ДАН, т. 219, № 6 (1974). ³ M. Petrescu, Rev. met., v. 6, 51 (1970). ⁴ U. Dahborg, K. E. Larson, Arch., Fysik, Bd. 33, 16 (1965).