

«Вязкостные и Акустические Свойства Расплава AlCu»

Р.М. Хуснутдинов, А.В. Мокшин,
С.Г. Меньшикова

E-mail: khrt@mail.ru

Казань, 2015

Особенности вязкости расплава AlCu

- Ветвление температурных зависимостей кинематической вязкости в режиме нагрева и охлаждения (гистерезис вязкости).
- Наличие экстремумов в концентрационных зависимостях коэффициента вязкости.

[1] W.R.D. Jones, W.L. Bartlett, J. Inst. Metals **83**, 59 (1954).

[2] К.И. Еретнов, А.П. Любимов, Изв. вузов. Цветная металлургия **1**, 119 (1966).

[3] M. Schick, J. Brillo, I. Egry, B. Hallstedt, J. Matter. Sci. **47**, 8145 (2012).

[4] Н.Ю. Константинова, П.С. Попель, Д.А. Ягодин, ТВТ **47**, 354 (2009).

Детали моделирования

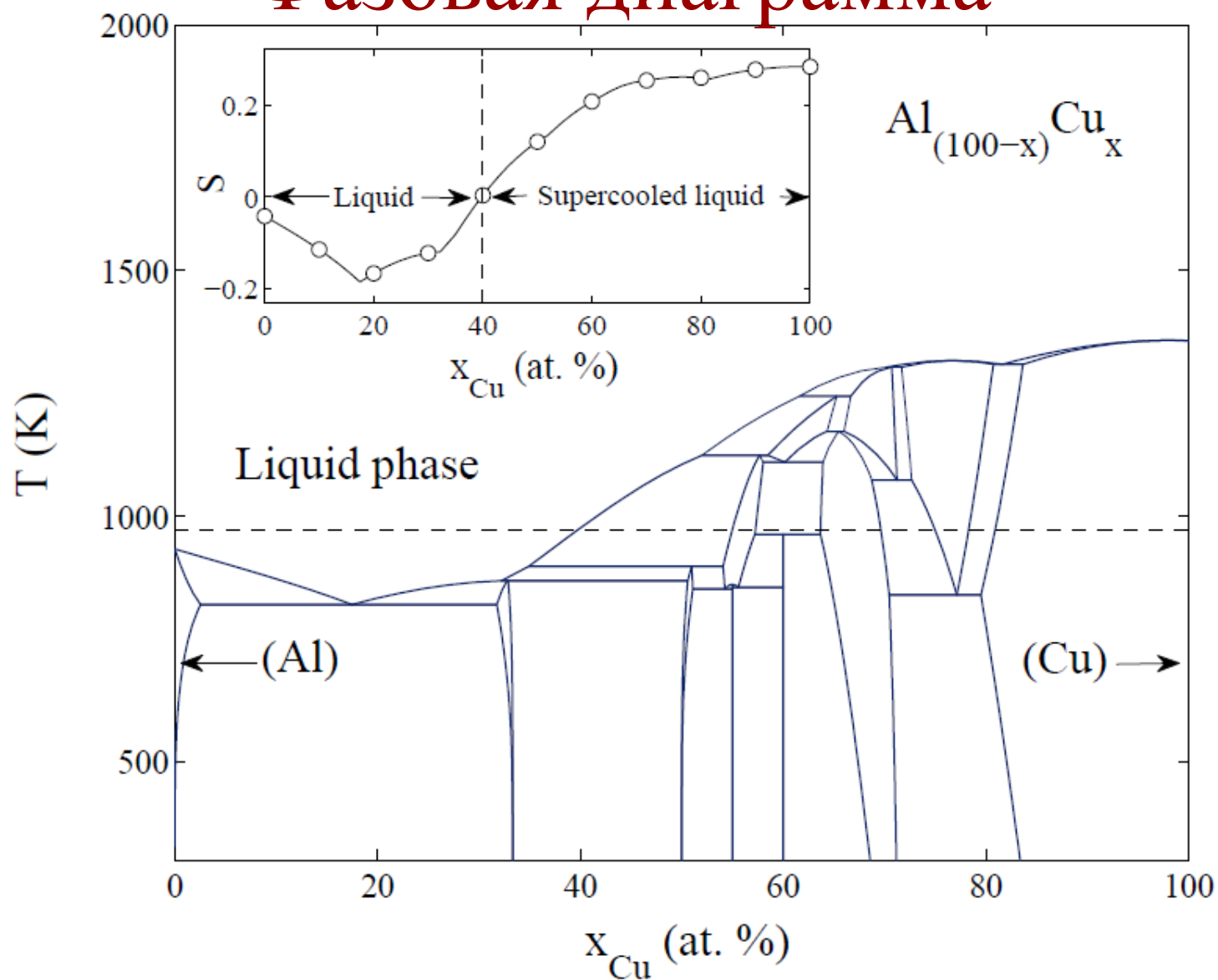
- Размер системы: $N=4000$ атомов
- Потенциал взаимодействия: EAM^[5]

$$U_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

- $T_{\text{in}}=3000$ K, $T_{\text{fin}}=973$ K
- Скорость охлаждения системы: $dT/dt = 10^{12}$ K/c

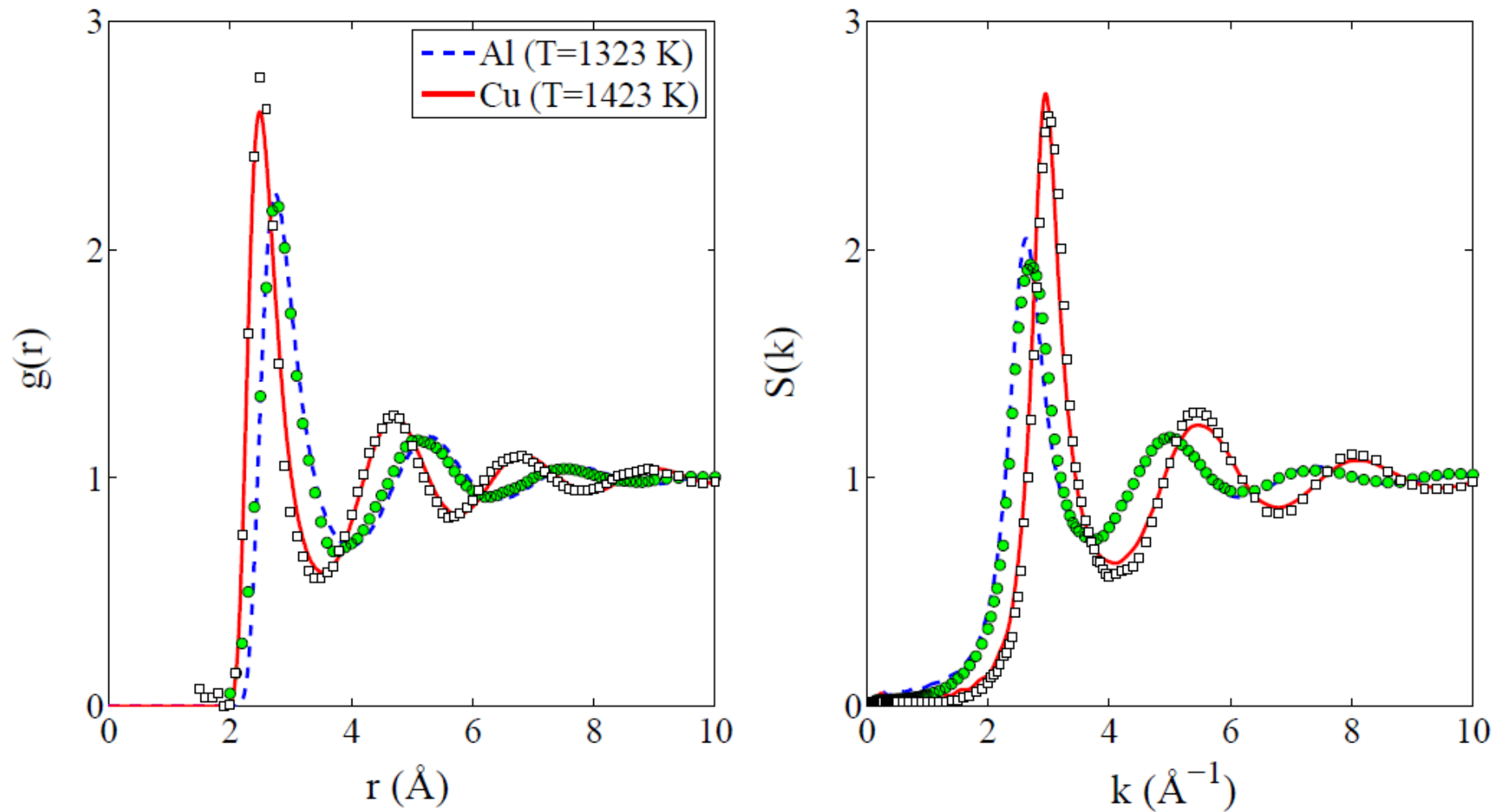
[5] J. Cai, Y.Y. Ye, Phys. Rev. B **54**, 8398 (1996).

Фазовая диаграмма



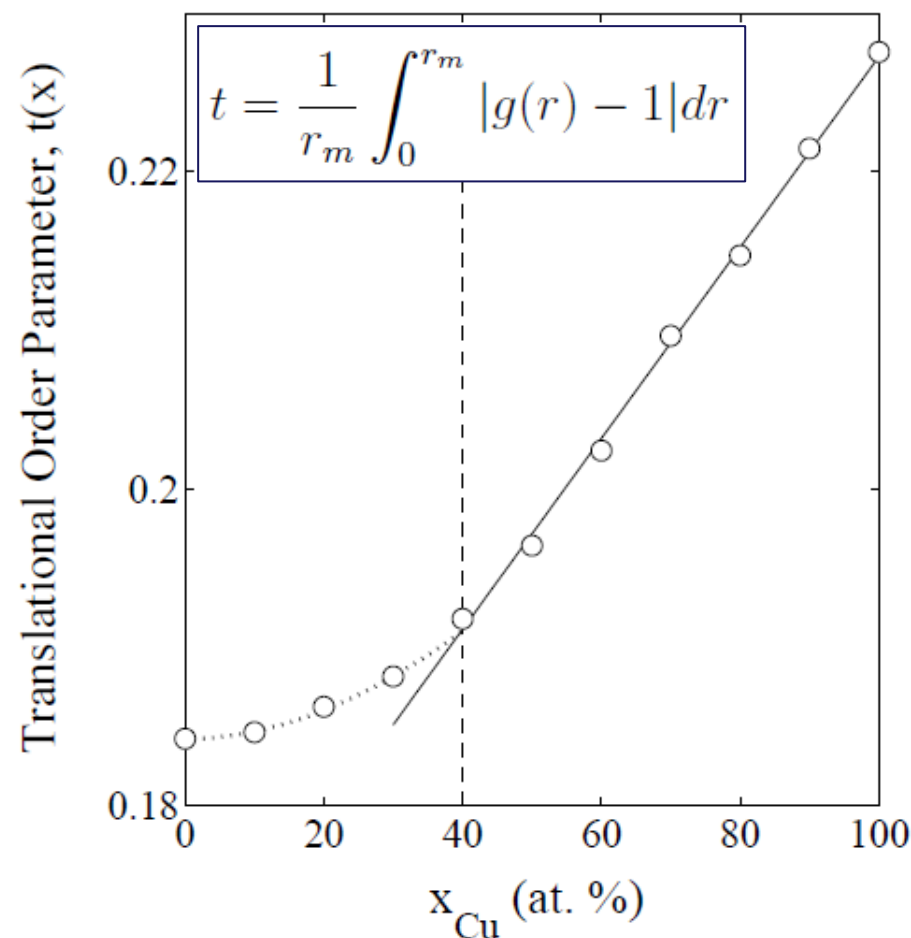
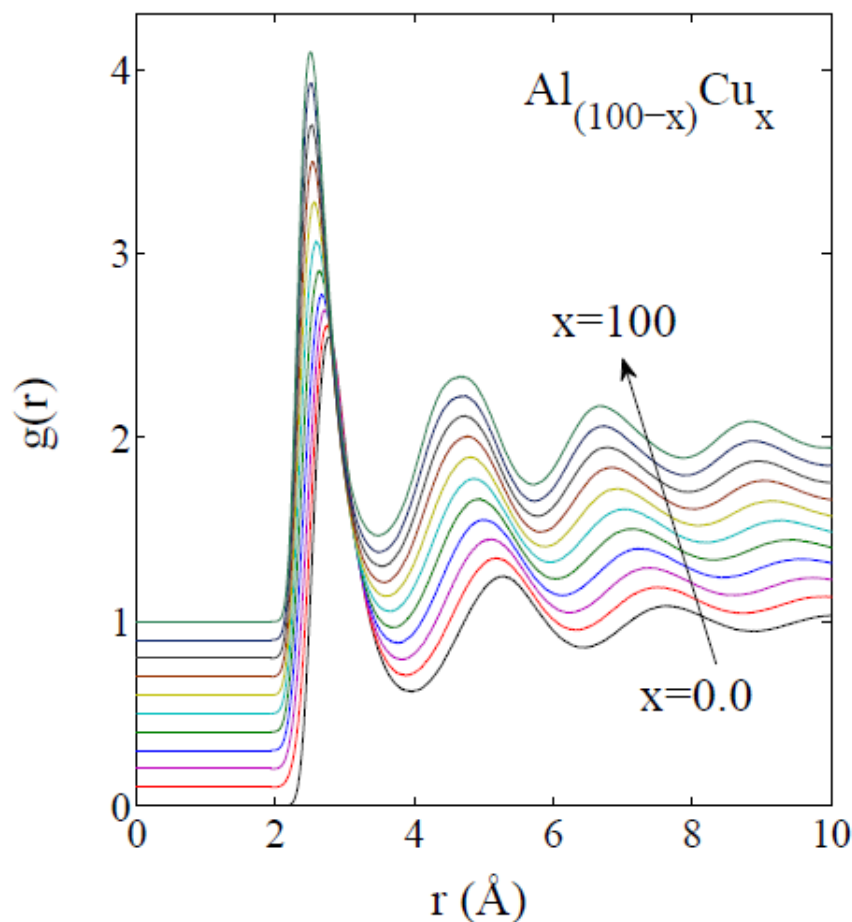
[6] V.T. Witusiewicz, U. Hecht, S.G. Fries, S. Rex, J. Alloys Compd. **385**, 133 (2004).

Результаты моделирования



[7] Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials: Liquids and Amorphous Solids*, McGraw-Hill, New York (1980).

Результаты моделирования



$$g(r) = \sum_{\alpha=\beta} W_{\alpha,\beta} g_{\alpha,\beta}(r) + 2 \sum_{\alpha \neq \beta} W_{\alpha,\beta} g_{\alpha,\beta}(r), \quad W_{\alpha,\beta} = c_{\alpha} c_{\beta} f_{\alpha} f_{\beta} / (\sum c_i f_i)^2$$

$$g_{\alpha,\beta}(r) = \frac{L^3}{N_{\alpha} N_{\beta}} \left\langle \sum_{j=1}^{N_{\alpha}} \frac{n_{j\beta}(r)}{4\pi r^2 \Delta r} \right\rangle, \quad \alpha, \beta \in \{Al, Cu\}.$$

Результаты моделирования

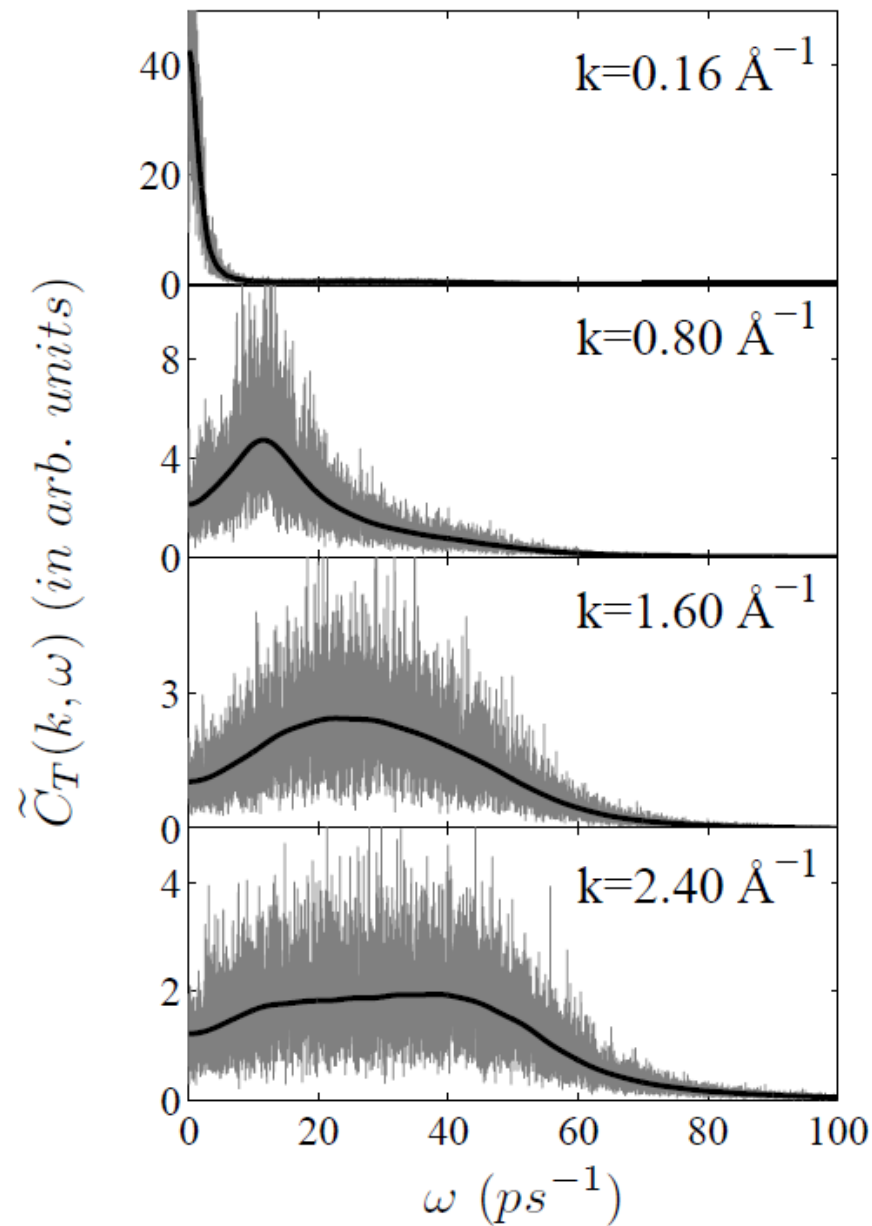
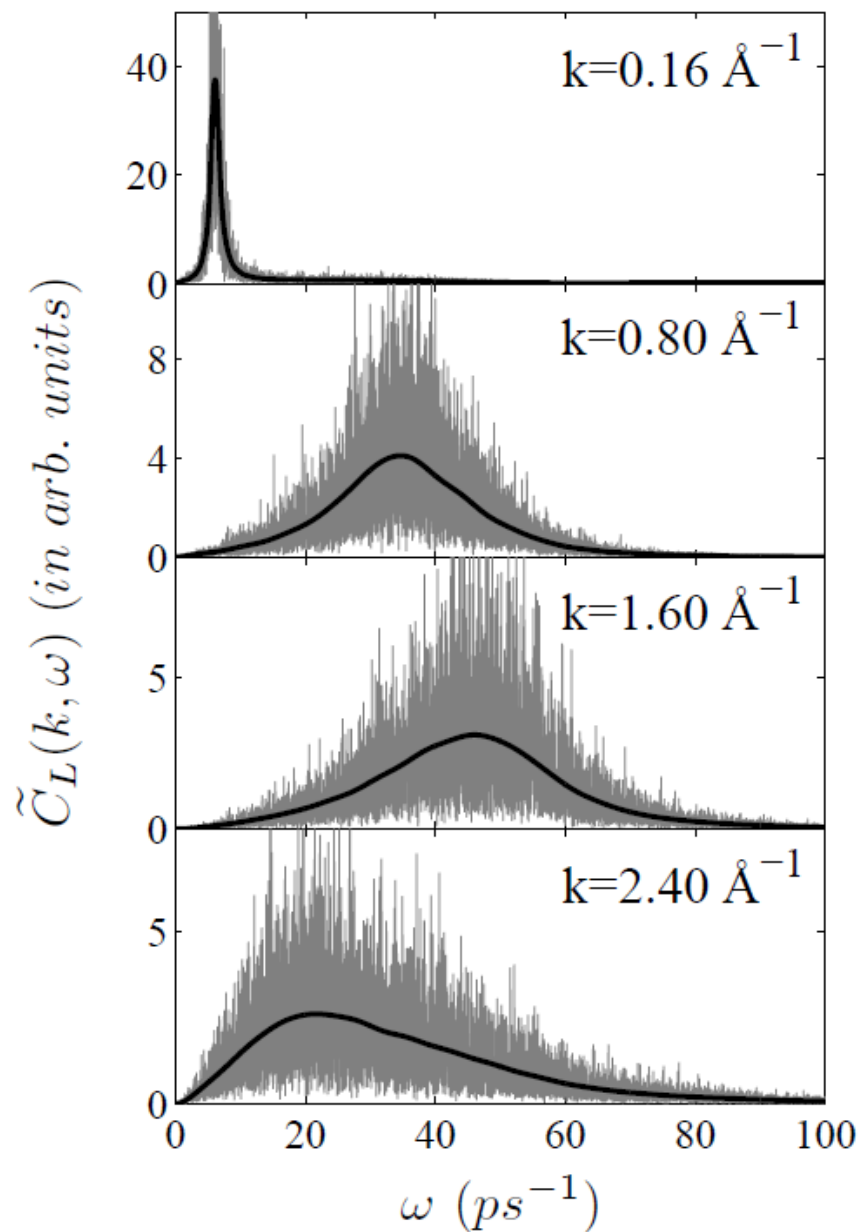
Спектры продольного и поперечного потока

$$\tilde{C}_\alpha(k, \omega) = \frac{k_B T}{\pi m} \int_0^\infty C_\alpha(k, t) e^{i\omega t} dt, \quad \alpha \in \{L, T\}$$

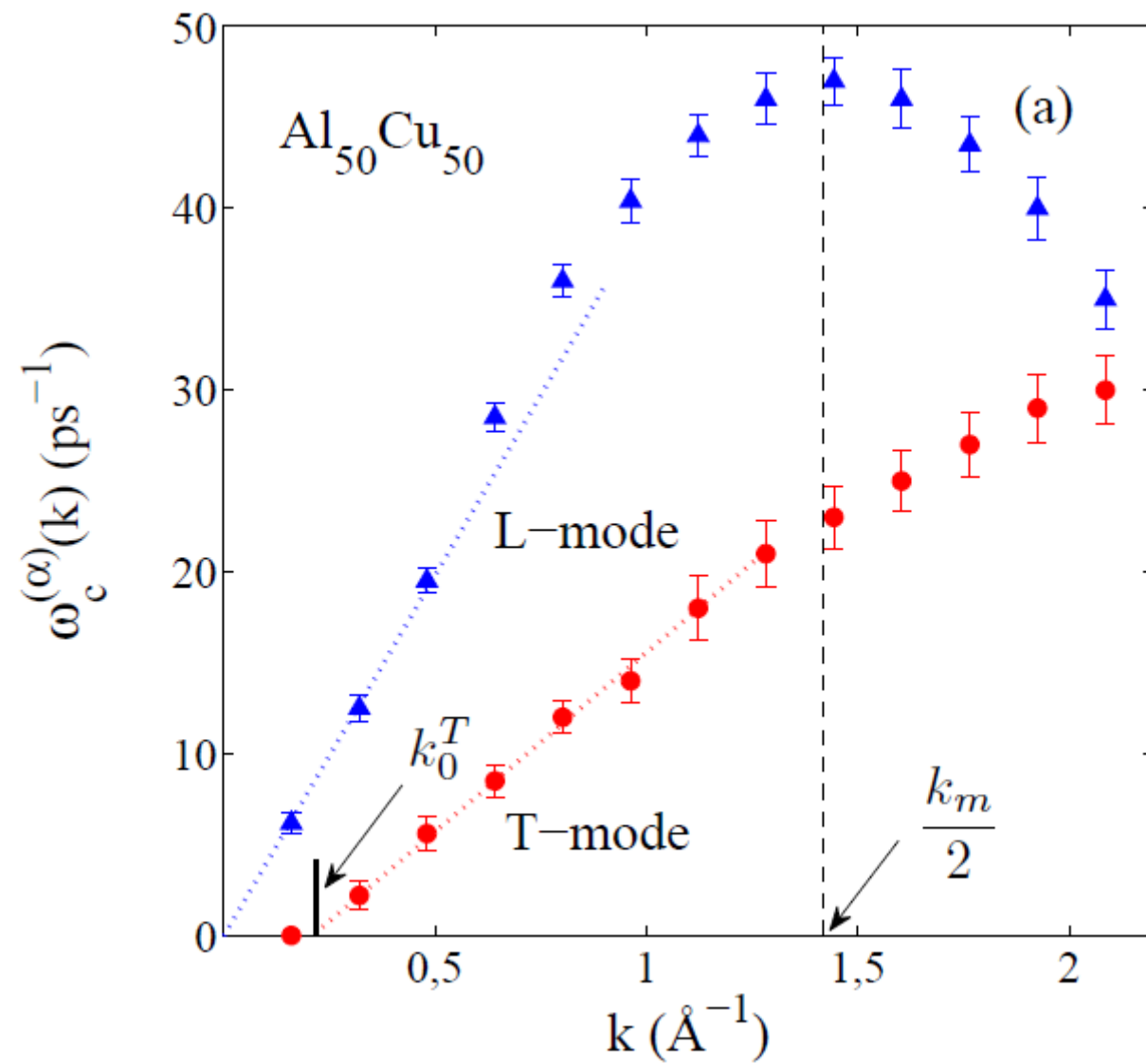
$$C_L(k, t) = \frac{\langle \vec{e}_k \cdot \vec{j}_k^*(0) \vec{e}_k \cdot \vec{j}_k(t) \rangle}{\langle |\vec{e}_k \cdot \vec{j}_k(0)|^2 \rangle} \quad C_T(k, t) = \frac{\left\langle \left([\vec{e}_k, \vec{j}_k^*(0)], [\vec{e}_k, \vec{j}_k(t)] \right) \right\rangle}{\left\langle \left| [\vec{e}_k, \vec{j}_k(0)] \right|^2 \right\rangle}.$$

$$\vec{j}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l^N \vec{v}_l(t) e^{-i(\vec{k}, \vec{r}_l(t))} \quad \text{- микроскопический поток}$$

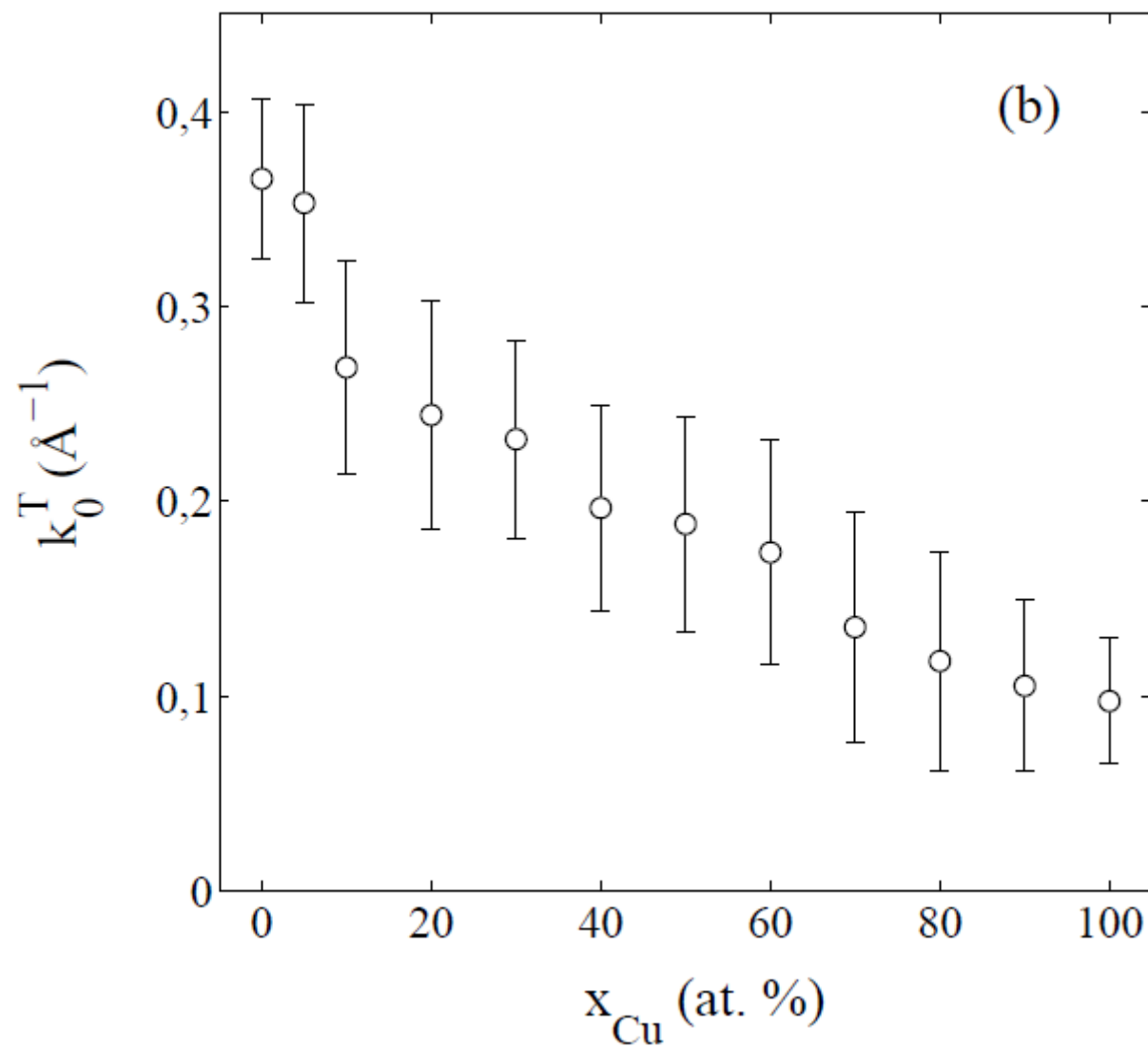
Результаты моделирования



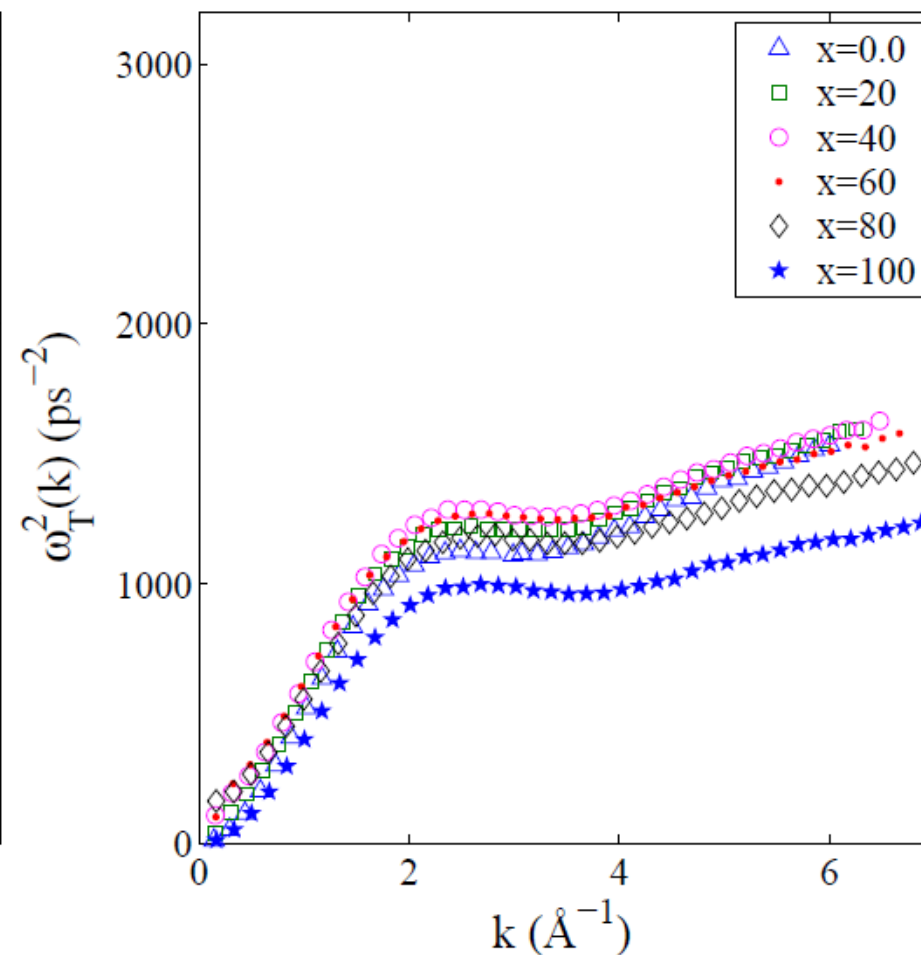
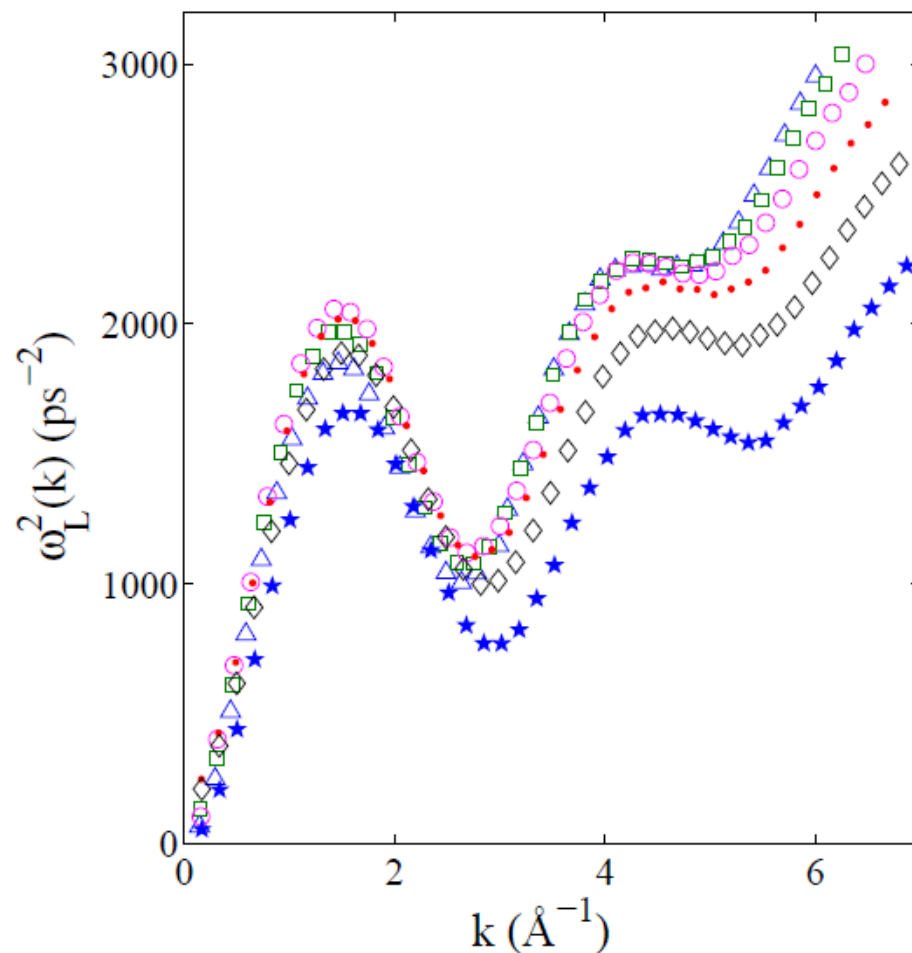
Результаты моделирования



Результаты моделирования

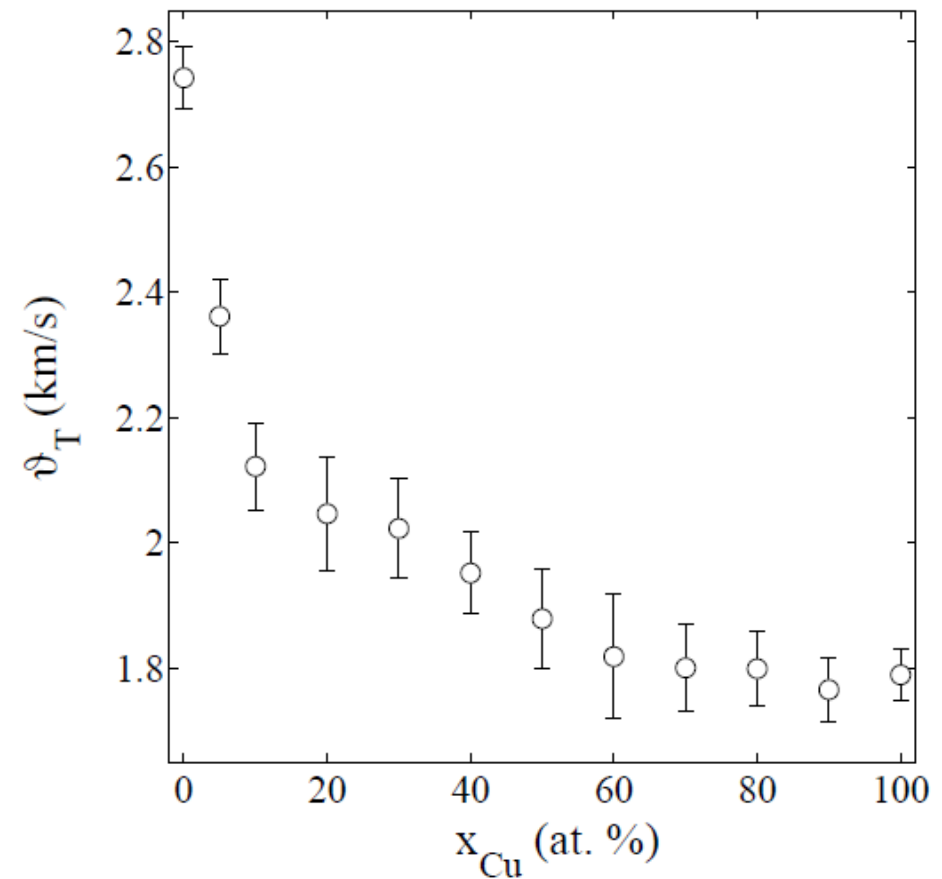
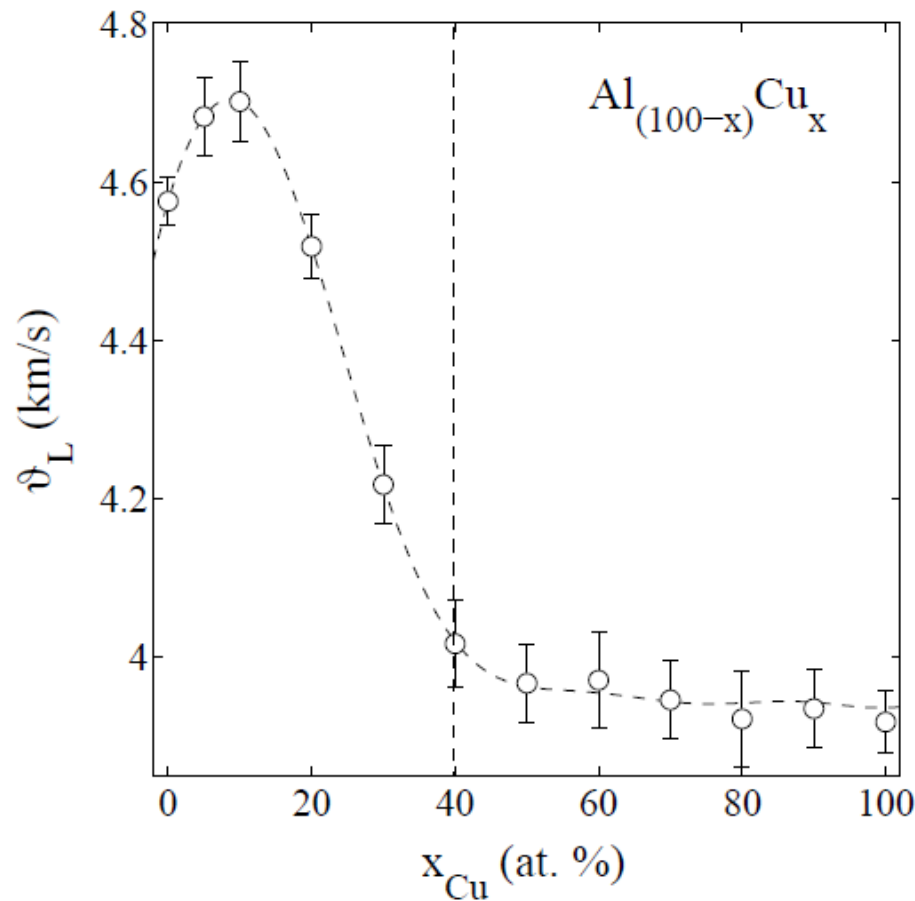


Результаты моделирования

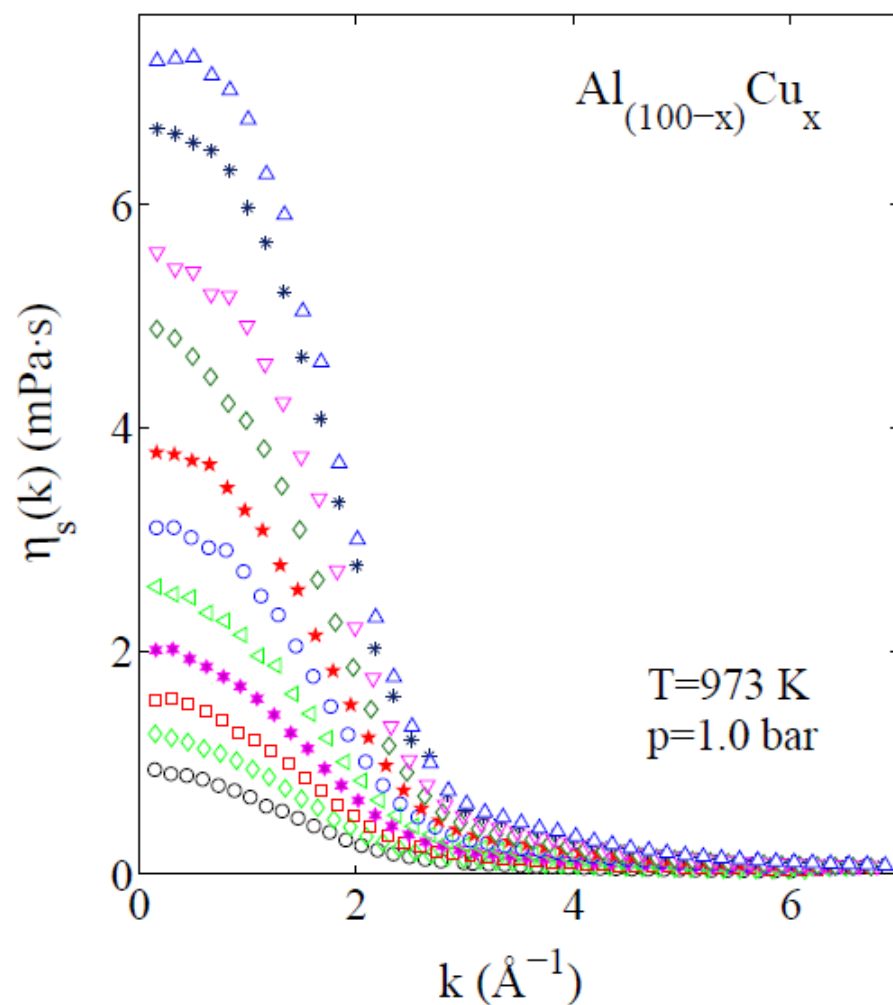


$$\omega_{\alpha}^{(2n)}(k) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \omega^{2n} \tilde{C}_{\alpha}(k, \omega) d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{C}_{\alpha}(k, \omega) d\omega} = (-1)^n \left(\frac{d^{(2n)} C_{\alpha}(k, t)}{dt^{(2n)}} \right) \bigg|_{t=0}, \quad n = 1, 2, \dots$$

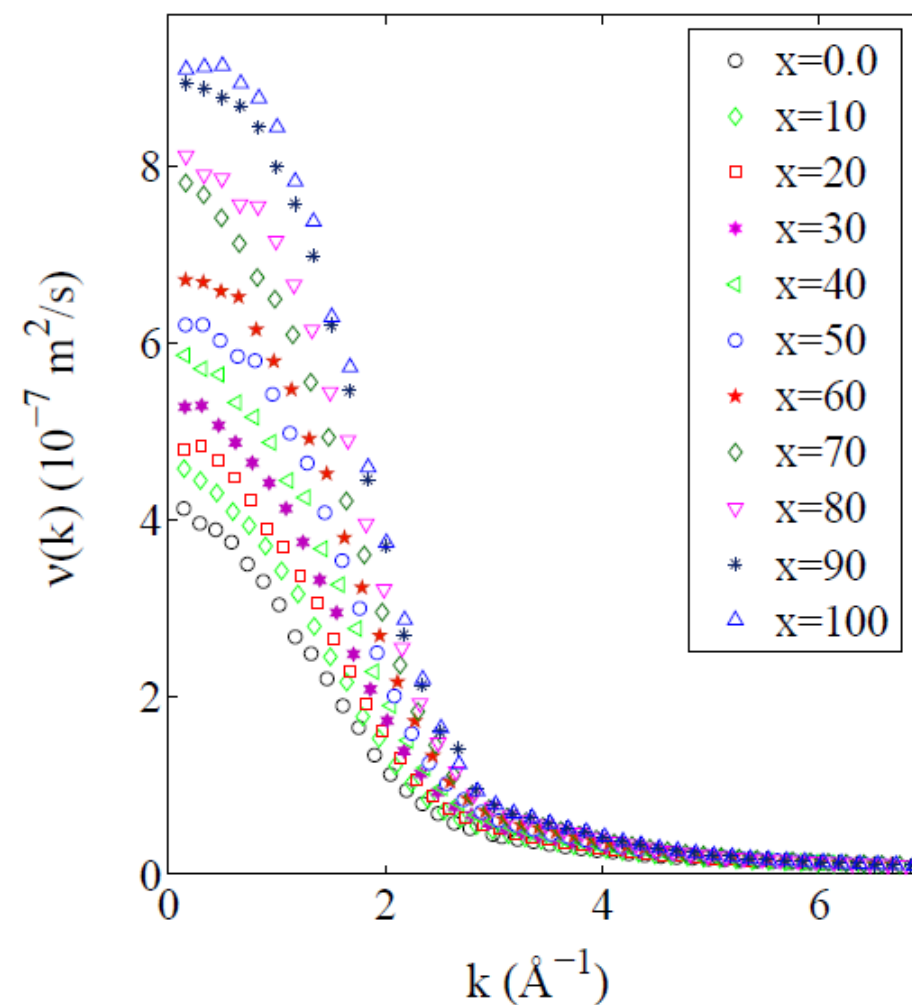
Результаты моделирования: Скорость звука продольной и поперечной поляризаций



Результаты моделирования

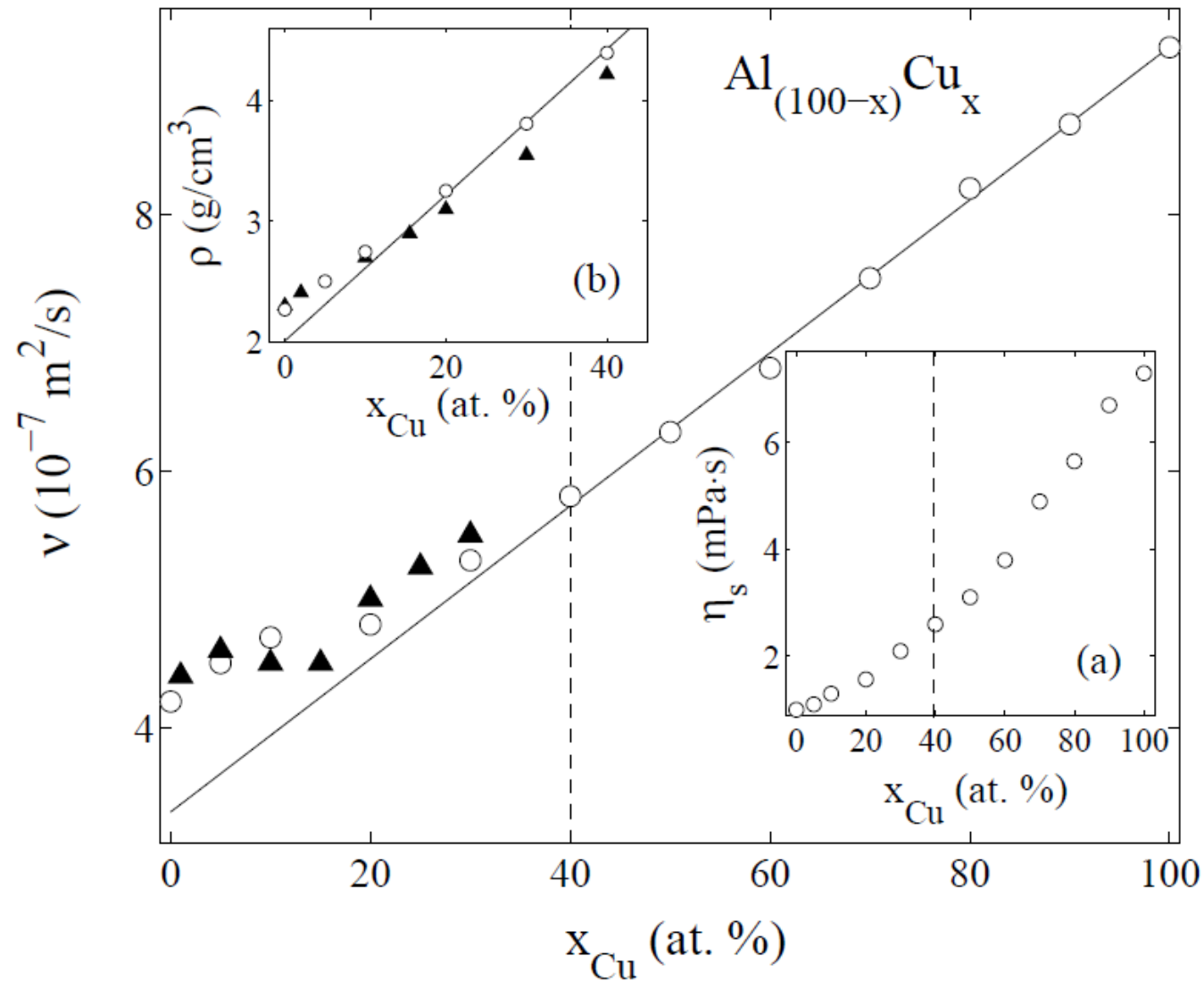


$$\eta_s(k) = \frac{\rho}{k^2 \int_0^\infty C_T(k, t) dt}$$



$$\nu = \eta_s / \rho.$$

Результаты моделирования



[8] J. Brillo, I. Egry, J. Westphal, Int. J. Matter. Res. **99**, 162 (2008).

[9] Y. Plevachuk, V. Sklyarchuk et al, Metall. Mater. Trans. A **39A**, 3040 (2008). 14

Выводы

На основе анализа равновесных структурных характеристик расплава $\text{Al}_{(100-x)}\text{Cu}_x$ показано, что концентрационная зависимость параметра трансляционного порядка верно предсказывает переход из состояния равновесной жидкости в состояние переохлажденного расплава при концентрации $x=40\%$ атомов меди.

Показано, что максимальное значение скорости звука на концентрационной зависимости наблюдается для случая равновесного расплава, в то время как переохлажденный расплав, насыщенный атомами меди характеризуется минимальными значениями скорости звука. Установлено, что характер зависимости скорости звука коррелирует с концентрационной зависимостью параметра $S(x)$.

Выводы

Обнаружено, что полная концентрационная зависимость кинематической вязкости характеризуется двумя режимами. В случае переохлажденного расплава, насыщенного атомами меди ($x > 40\%$) $\nu(x)$ интерполируется линейной зависимостью, а в случае равновесного расплава при $x < 40\%$ наблюдается отклонение от линейной зависимости. При этом в области низких концентраций меди $x = 10\% \pm 5\%$, наблюдается незначительное “плечо” в $\nu(x)$, наличие которого также подтверждается экспериментальными результатами. Появление этого “плеча” обусловлено особенностями в концентрационной зависимости плотности.

Работа поддержана грантами РФФИ (проекты № 14-02-00335-а и № 15-02-06288-а).

