

Аннотационный отчет

Изучение вязких свойств расплавов и жидкостей в области стеклования при охлаждении

Е.М. Кирова

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 . 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. 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].

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.

Публикации:

- 1)Kirova E.M., Norman G.E. Viscosity calculations at molecular dynamics simulations. Принята в Journal of Physics: Conference Series
 - 2)Труды 56-й всероссийской научной конференции МФТИ. М.: МФТИ 2014. С. 24
 - 3)Труды 57-й научной конференции МФТИ с международным участием, посвященной 120-летию со дня рождения П. Л. Капицы. Молекулярная и химическая физика. М.: МФТИ 2014. С. 35.
 - 4)XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. March 1-6, Elbrus. Russia. Book of abstracts. 2015. P.189.
 - 5) Kirova E.M., Norman G.E. Viscosity calculations at molecular dynamics simulations. Принята в Journal of Physics: Conference Series.
 - 6)13-th Workshop on Complex Systems of Charged Particles and their Interaction with Electromagnetic Radiation. 2015. С.44.
 - 7)Фундаментальные основы МЭМС и нанотехнологий. Доклады конференции 2015. Вып. 5 Том 1. С.202
 - 8)Фундаментальные основы МЭМС и нанотехнологий. Доклады конференции 2015. Вып. 5 Том 1. С.206
 - 9)Тезисы докладов 12-го российского симпозиума атомистическое моделирование, теория и эксперимент Foundations of Atomistic Modeling and Simulation. 2015.
 - 10)Поданы тезисы на тему Кирова Е.М., Писарев В.В. Вязкость расплава алюминия при стекловании по данным молекулярной динамики на публикацию в трудах 58-й международной научной конференции МФТИ.
- Готовятся к печати:

Кирова Е.М., Норман Г.Э., Тимофеев А.В. Расчет коэффициентов переноса в пылевой плазме.

Кирова Е.М., Писарев В.В. Вязкость жидкого алюминия в процессе стеклования.

Выступления:

1)56-я всероссийская научная конференция МФТИ. 25–30 ноября 2013 года.

Кирова Е.М., Норман Г.Э. Сравнительный анализ двух способов: Кубо-Грина и Эйнштейна-Гельфанда для вычисления коэффициента сдвиговой вязкости и других свойств переноса на примерах простых и сложных систем. *Устный доклад, сделанный Кировой Е.М.* на секции физики высокотемпературных процессов.

2)57-я научная конференция МФТИ с международным участием, посвященная 120-летию со дня рождения П.Л. Капицы. 24–29 ноября 2014 года.

Кирова Е.М., Норман Г.Э. Расчет коэффициентов переноса в сложных средах. *Устный доклад, сделанный Кировой Е.М.* на секции молекулярной физики .

3)XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. March 1-6, 2015, Elbrus, Kabardino-Balkaria, Russia

Kirova E.M., Norman G.E. Viscosity calculations at molecular dynamics simulations. *Устный доклад, сделанный Кировой Е.М.*

4)13th Workshop on Complex Systems of Charged Particles and their Interaction with Electromagnetic Radiation. Moscow. April 8-10, 2015

Kirova E.M., Norman G.E., Timofeev A.V. Dusty plasma viscosity *Устный доклад, сделанный Кировой Е.М.*

5)Фундаментальные основы МЭМС и нанотехнологий. Новосибирск, 15–18 июня 2015 г.

Кирова Е.М., Норман Г.Э., Тимофеев А.В. Вязкость пылевой плазмы. *Устный доклад, сделанный Кировой Е.М.*

6)Фундаментальные основы МЭМС и нанотехнологий. Новосибирск, 15–18 июня 2015 г.

Кирова Е.М., Норман Г.Э., Писарев В.В. Вязкость атомарных жидкостей и стекол по данным молекулярной динамики.

Устный доклад, сделанный Писаревым В.В.

7)Атомистическое моделирование, теория и эксперимент. Новый Афон 16-27 августа 2015 Кирова Е.М., Норман Г.Э., Тимофеев А.В. Расчет коэффициентов переноса пылевой плазмы.

Устный доклад сделан Кировой Е.М.

8)Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов. Екатеринбург, 21-25 сентября 2015 Кирова Е.М., Писарев В.В. Вязкость расплава алюминия при стекловании по данным молекулярной динамики.

Устный доклад, сделан Писаревым В.В