

Динамические характеристики конденсированных систем вблизи температуры стеклования

Б. Н. Галимзянов¹, А. В. Мокшин¹

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18

В работе рассматриваются динамические характеристики неупорядоченных конденсированных систем в температурной области, находящейся вблизи температуры стеклования T_g . Исследуется задача, связанная с единым описанием поведения динамической вязкости [1]. Для решения этой задачи в работе используется оригинальная приведенная температура и соответствующая приведенная температурная шкала, которая является единой для различных систем [2,3]. Также в работе изложен метод масштабирования абсолютной температурной шкалы, который позволяет корректно сопоставить и выполнить анализ температурного поведения различных физических величин, полученных как через моделирование, так и с помощью экспериментальных методов.

Особое внимание уделяется к рассмотрению динамических характеристик различных конденсированных систем - силикатных, боратных, германиевых, а именно температурной зависимости вязкости. Известно, что исходя из температурного поведения вязкости, эти системы можно классифицировать на сильные и хрупкие стеклообразующие системы, где используется приведенная температурная шкала T_g/T [2]. Здесь возникает необходимость в приведенной температурной шкале, независимой от свойств системы и от способа его приготовления (например, от скорости охлаждения жидкости или расплава) [3].

В настоящей работе предлагается оригинальный метод масштабирования абсолютной температурной шкалы T , которая заменяется приведенной температурой \tilde{T} следующим образом [3]

$$\tilde{T} = \frac{0.5T_m^2 - T_g^2}{T_m(T_m - T_g)} \left(\frac{T}{T_g} \right) + \frac{T_g(T_g - 0.5T_m)}{T_m(T_m - T_g)} \left(\frac{T}{T_g} \right)^2, \quad (1)$$

где T_m - есть температура плавления системы. Если для системы известны температуры T_m и T_g , то температурные точки ранжируются одинаковым образом для всех систем с учетом следующих условий [3]: при $T=0$ имеем $\tilde{T}=0$, при $T=T_g$ имеем $\tilde{T}=0.5$ и при $T=T_m$ имеем $\tilde{T}=1.0$.

При использовании приведенной температурной шкалы \tilde{T} наблюдается универсальность и корреляция в температурном поведении вязкости различных систем, полученных как через моделирование молекулярной динамики, так и с помощью экспериментальных методов [1-3].

Молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и на суперкомпьютере межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук. Работа выполнена при финансовой поддержке грантом Президента РФ МД-5792 2016 2 и грантом РФФИ № 14-02-00335-а.

- [1] Fokin V.M., Zanotto E.D., Schmelzer J.W.P. Homogeneous nucleation versus glass transition temperature of silicate glasses // J. Non-Cryst. Solids, 2003. 321. P. 52-65.
- [2] Martinez L.-M. and Angell C.A. A thermodynamic connection to the fragility of glass-forming liquids // Nature, 2001. 410. P. 663-667.
- [3] Mokshin A.V. and Galimzyanov B.N. Scaling law for crystal nucleation time in glasses // J. Chem. Phys, 2015. 142. P. 104502(1)-104502(10).

Дендритная структура: эмпирика, эволюция, системный анализ

В. М. Голод¹, К. И. Емельянов¹

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Дендритная структура литого металла, интенсивно изучаемая на протяжении многих лет [1-2], остается объектом, значимость которого для управления качеством отливок и слитков является общепризнанной, и вместе с тем она не может быть достоверно охарактеризована как с использованием теоретических разработок, так и на основе обобщения накопленных экспериментальных данных. Обзор обширного круга публикаций по дендритной структуре стали, материалы которого опубликованы в трех номерах журнала «Черные металлы» [3-5], приводит к следующим выводам:

- публикуемые данные о структуре дендритов содержат почти исключительно характеристики средних значений первичных λ_1 и вторичных λ_2 междоусных промежутков, как правило, - без указания условий регистрации (без разделения стационарных опытных и нестационарных производственных данных), количества обработанных значений и характеристик полученного разброса данных σ_λ или коэффициента корреляции R приводимых однофакторных степенных статистических моделей;
- в качестве определяющих факторов в этих моделях используется статистический набор кинетических параметров $\lambda_i = K(G_T)^\alpha (G_T)^\beta (G_T)^\gamma (G_T)^\delta$; $i=1,2$ - температурного градиента G_T , скорости кристаллизации V , скорости охлаждения V_0 или локальной продолжительности затвердевания τ_{LS} , определяемых по различным методикам и формулам (на ликвидусе или солидусе, в среднем по ширине зоны затвердевания, на основе равновесных или фактических значений температур и т.д.);