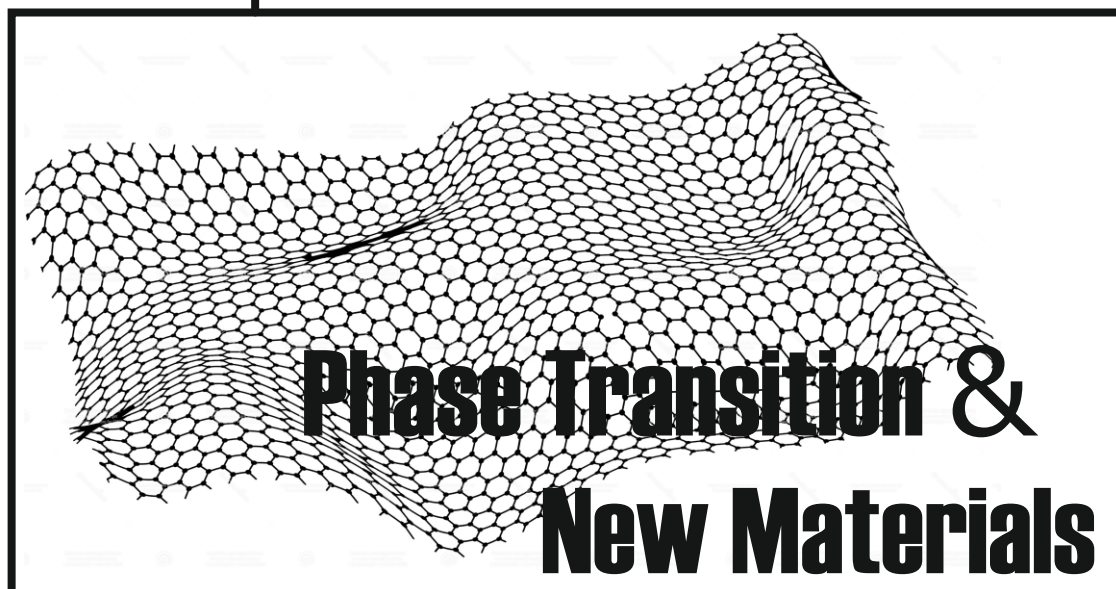


Proceedings of the
First International
Interdisciplinary Congress



**Ordering in
Minerals &
Alloys**

**Order, disorder &
properties of oxydes**

1-10 of September 2020
Nalchik - Rostov-on-Don - Shepsi, Russia

Труды Первого Международного
Междисциплинарного Научного Конгресса
**Фазовые переходы и
новые материалы**

1-10 сентября 2020
г.Нальчик - г.Ростов-на-Дону -
пос. Шепси, Россия

УДК 536: 539.2:548:549
ББК 22.37

Первый Международный междисциплинарный научный конгресс "Фазовые переходы & Новые материалы " PT&NM-2020, Нальчик-Ростов-на-Дону – Москва - пос. Шепси, 1-10 сентября 2020г. Труды конгресса.- Ростов-на-Дону, Фонд науки и образования. 2020 - 371 с

ISBN 978-5-907361-03-4

**УДК 536.7: 539.2:548:549
ББК 22.37**

© ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» (КБГУ)
© Оформление «Фонд науки и образования», 2020

VISCOUS PROPERTIES OF NICKEL-BASED BINARY METAL MELTS

R.M. Khusnutdinoff, R.R. Khairullina and A.V. Mokshin

*Kazan Federal University,
420008, Kazan
Kremlevskaya Str., 18, Russia
khrm@mail.ru*

The paper presents the results of a numerical study of the viscosity of nickel-based binary metal melts for a wide range of temperatures, including the region of equilibrium liquid phase and supercooled melt. It has been shown that the temperature dependences of the viscosity of binary metal melts are described by the unified universal Kelton model. Based on the analysis of the viscosity coefficient of the composition of the binary melt in the framework of the scaled Rosenfeld transformations, it was found that for the correct description of the viscosity of binary/multicomponent metal melts in the framework of entropy models, it is necessary to use a more complex representation of the excess entropy S_{ex} than in the approximation of pair correlation entropy S_2 .

ВЯЗКОСТНЫЕ СВОЙСТВА НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩИХ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

Р.М. Хуснутдинов, Р.Р. Хайруллина и А.В. Мокшин

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Казань,
ул. Кремлевская, 18, Россия
khrm@mail.ru*

В работе представлены результаты численного исследования вязкости никельсодержащих бинарных металлических расплавов для широкой области значений температур, включая область равновесной жидкой фазы и переохлажденного расплава. Показано, что температурные зависимости вязкости бинарных металлических расплавов описываются единой универсальной моделью Келтона. На основе анализа коэффициента вязкости от состава бинарного расплава в рамках масштабных преобразований Розенфельда установлено, что для корректного описания вязкости бинарных/многокомпонентных металлических расплавов в рамках энтропийных моделей необходимо использование более сложного представления избыточной энтропии S_{ex} , чем в приближении парной корреляционной энтропии S_2 .

Введение. Вязкость – одна из важнейших характеристик, определяющая релаксационные особенности, теплофизические и транспортные свойства вещества; обладает высокой чувствительностью к структурным трансформациям и фазовым переходам, а также играет важную роль в кинетике химических реакций [1]. В то же время, температурная зависимость вязкости определяет так называемую стеклообразующую (аморфообразующую) способность системы (*glass-forming ability*), которая может оцениваться через индекс хрупкости (*fragility index*) [2]. Косвенные экспериментальные методики, такие как неупругое рассеяние нейтронов, рентгеновских лучей, бриллюэновское рассеяние света характеризуются значительными неточностями в определении транспорт-

ных коэффициентов (диффузии, вязкости). В то же время, определение вязкости с помощью вискозиметрии (метод капиллярной вискозиметрии, метод крутильных колебаний, ультразвуковой метод и др.) сопряжено со значительными трудностями, обусловленные в первую очередь, низкой чувствительностью и несовершенством экспериментальных методик [3]. Другой альтернативой в нахождении вязкости являются методы классического и квантовомеханического моделирования, которые характеризуются рядом серьезных ограничений: первые – точностью и предсказательной способностью потенциалов межатомного взаимодействия, вторые – наличием приближений в обменно-корреляционном потенциале и ограниченностью временных масштабов симуляций. Таким образом, уточнение абсолютных значений и разработка универсальных моделей вязкости представляет одну из важных задач современной теплофизики и физики конденсированного состояния вещества [4]. Целью настоящего исследования является определение абсолютных значений вязкости для алюминий-никелевых и железоникелевых расплавов, а также проверка применимости различных квазиуниверсальных моделей к описанию вязкости бинарных металлических расплавов.

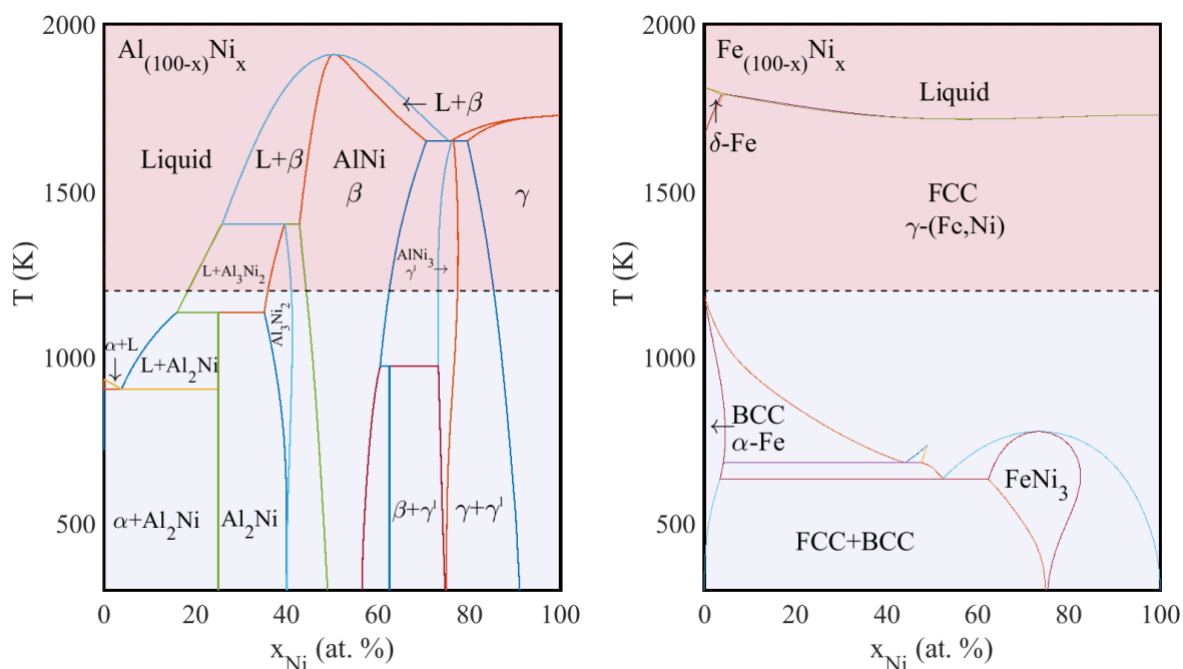


Рис. 1. Фазовые диаграммы для системы алюминий-никель $Al_{(100-x)}Ni_x$ (левая колонка) и системы железо-никель $Fe_{(100-x)}Ni_x$ (правая колонка) [5]. Исследуемая в работе область выделена розовым цветом.

Детали моделирования. Моделирование атомарной динамики никельсодержащих металлических расплавов $Al_{(100-x)}Ni_x$ и $Fe_{(100-x)}Ni_x$ выполнялось в NpT -ансамбле при давлении $p=1.0$ бар для диапазона температур $T=[1200; 2000]$ K, что охватывает область равновесной жидкой фазы и область переохлажденного состояния (см. фазовую диаграмму на рис. 1). Исследуемые системы состояли из $N=32000$ атомов, расположенные в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Взаимодействия между частицами осуществлялись с помощью потенциалов EAM-типа [6] и [7], соответственно. Бинарные расплавы были получены быстрым охлаждением систем из высокотемпературного равновесного состояния с $T=3000$ K. Скорость охлаждения систем составила $\gamma=10^{12}$ K/c. Интегрирование уравнений движений атомов выполнялось с помощью алгоритма Верле в скоростной форме с временным шагом 1.0 фс. Для приведения систем в состояние термодинамического равновесия программой было выполнено

$1.5 \cdot 10^7$ временных шагов и $2 \cdot 10^8$ шагов для расчета временных корреляционных функций.

Результаты и выводы. Сдвиговая вязкость была рассчитана на основе данных моделирования атомарной динамики с помощью соотношения Кубо-Грина

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle \sigma_{\alpha\beta}(t) \sigma_{\alpha\beta}(0) \rangle dt, \quad (1)$$

где угловые скобки обозначают, усреднение по времени и ансамблю частиц, k_B есть постоянная Больцмана, V – объем системы, $\sigma_{\alpha\beta}$ есть недиагональные компоненты тензора напряжений. В работе [8] было показано, что температурная зависимость вязкости для ряда металлических расплавов может описываться единым универсальным соотношением:

$$\eta = \eta_0 \exp\left(\frac{E}{k_B T}\right), \quad E = E_\infty + k_B T_A (b T_r)^z \Theta(T_A - T). \quad (2)$$

Здесь η_0 есть предэкспоненциальный множитель, соответствующий формально значению коэффициенту вязкости при $T \rightarrow \infty$; E – высота (энергия) активационного барьера вязкостного процесса; T_A есть температура Аррениуса – температура, при которой в температурной зависимости вязкости начинает наблюдаться отклонение от закона Аррениуса; $\Theta(x)$ – функция Хевисайда и $T_r = (T_A - T)/T_A$ есть приведенная температура.

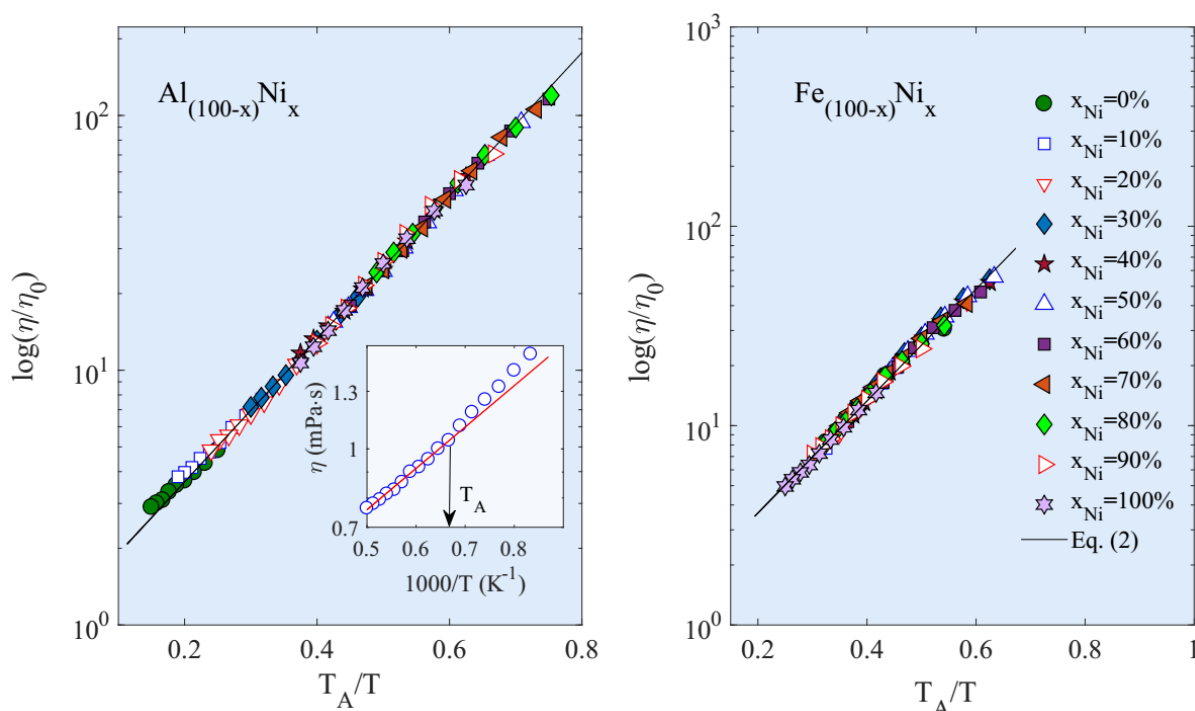


Рис. 2. Температурные зависимости перемасштабированных значений вязкости расплавов $\text{Al}_{(100-x)}\text{Ni}_x$ (левая колонка) и $\text{Fe}_{(100-x)}\text{Ni}_x$ (правая колонка) при различных концентрациях атомов никеля: маркеры представляют результаты моделирования атомарной динамики; сплошная линия – универсальная кривая вязкости, рассчитанная по формуле (1). Вставка: Температурная зависимость логарифма вязкости, показывающая отклонение от закона Аррениуса ниже температуры T_A .

На рис. 2 представлены перемасштабированные температурные зависимости вязкости для алюминий-никелевых (левая колонка) и железоникелевых (правая колонка) расплавов при различных концентрациях атомов никеля. Как видно из рисунка все темпера-

турные зависимости $\eta(T)$ хорошо описываются универсальной моделью вязкости [8]. Подобранные значения параметров модели составили $E_\infty=6.47T_A$, $b=4.536$ и $z=2.89$. Процедура определения температуры Аррениуса T_A представлена во вставке к рисунку. Отметим, что температура Аррениуса T_A связывается с отклонением в температурной зависимости вязкости от аррениусовского поведения.

Проверим квазиуниверсальность вязкости бинарных расплавов в зависимости от состава в рамках масштабного соотношения Розенфельда [9]:

$$\eta^* = \eta \frac{\rho^{-2/3}}{(mk_B T)^{1/2}} = B \exp(-\beta S_{ex}). \quad (3)$$

Здесь ρ есть количественная плотность системы, m – масса атомов, B и β есть размерные коэффициенты, которые для модельных систем принимают значения 0.2 и 0.8 соответственно. Избыточная (конфигурационная) энтропия S_{ex} в выражении (3) была заменена парной корреляционной энтропией S_2 :

$$S_2 = -2\pi\rho \sum_{i,j} x_i x_j \int_0^\infty \{g_{ij}(r) \ln[g_{ij}(r)] - [g_{ij}(r) - 1]\} r^2 dr, \quad (4)$$

где $g_{ij}(r)$ – есть парциальные функции радиального распределения атомов; индексами i и j обозначены компоненты (сорта атомов) бинарного расплава. В ряде недавних работ [9] было показано, что в случае одноатомных жидкостей двухчастичный вклад в избыточную энтропию может составлять 85÷95% для довольно широкого диапазона плотностей. В то же время, для металлических расплавов, где преобладают вклады от многочастичных взаимодействий, очевидно, что такое приближение может приводить к заметным отклонениям от квазиуниверсального характера поведения вязкости.

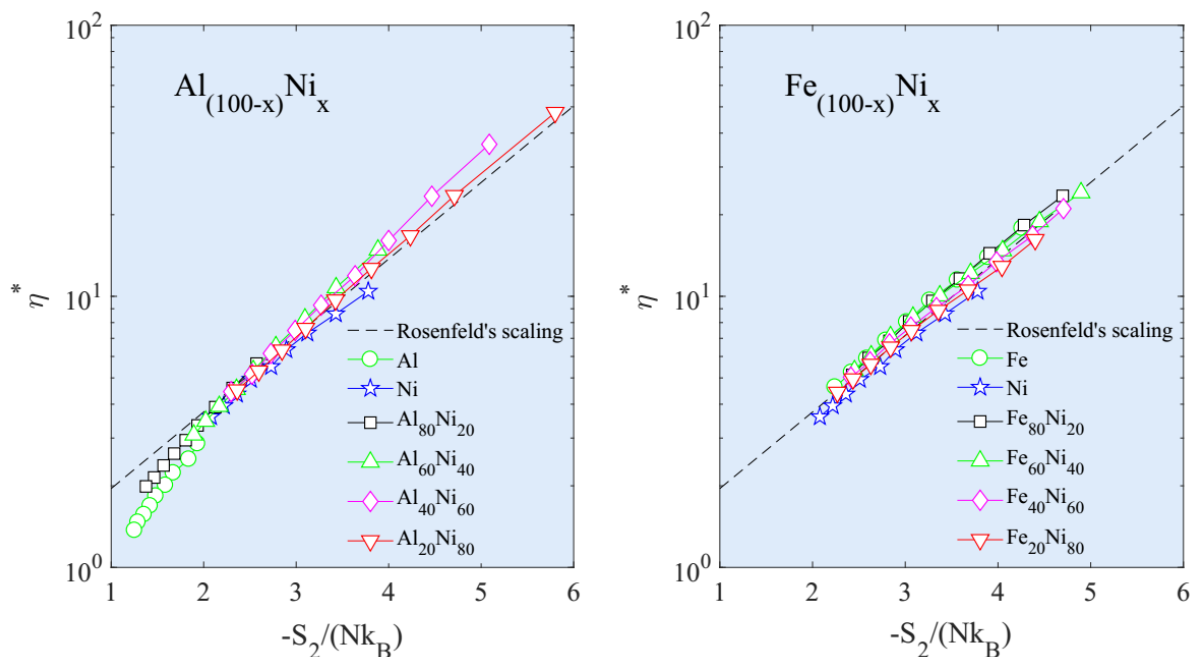


Рис. 3. Приведенная вязкость η^* бинарных никельсодержащих металлических расплавов как функция конфигурационной энтропии: маркеры – результаты моделирования атомарной динамики; пунктирная линия – масштабное соотношение Розенфельда для вязкости с параметрами $B=1.02$ и $\beta=0.65$.

На рис. 3 представлена приведенная вязкость η^* как функция конфигурационной энтропии для бинарных никельсодержащих металлических расплавов. Маркерами здесь представлены результаты моделирования атомарной динамики, пунктирной линией –

масштабное соотношение Розенфельда для вязкости [уравнение (3) с параметрами $B=1.02$ и $\beta=0.65$]. Как видно из рисунка, для алюминий-никелевых расплавов с изменением состава не наблюдаются какие-либо универсальные особенности в поведении вязкости, в то время как, вязкость железоникелевых расплавов демонстрируют некоторые общие, квазиуниверсальные особенности. Одним из возможных объяснений в сильном расхождении вязкости для $Al-Ni$ расплавов с изменением состава является различие в массах атомов алюминия и никеля. Так, например, отношения масс компонент для рассмотренных бинарных металлических расплавов составляют $m_{Al}/m_{Ni} \approx 0.46$ и $m_{Fe}/m_{Ni} \approx 0.95$. Кроме того, химические особенности рассматриваемых компонент также различны: железо и никель относятся к ферромагнитным элементам с магнитными моментами $\mu=2.2\mu_B$ и $\mu=0.64\mu_B$, соответственно. В то же время алюминий является парамагнитным металлом. И, как следствие, алюминий-никелевые и железоникелевые расплавы будут отличаться характером многочастичных взаимодействий. Таким образом, мы заключаем, что для корректного описания вязкости бинарных/многокомпонентных металлических расплавов в рамках энтропийных моделей необходимо использование более сложного представления избыточной энтропии S_{ex} , чем в приближении парной корреляционной энтропии S_2 .

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета. Работа поддержана грантом РФФИ (№ 18-02-00407-а).

Список цитируемой литературы

1. K. Trachenko, V. V. Brazhkin, Sci. Adv. **6**, 3747 (2020).
2. J. Bellissard, T. Egami, Phys. Rev. E **98**, 063005 (2018).
3. J. Cheng, J. Grobner, N. Hort et al, Meas. Sci. Technol. **25**, 062001 (2014).
4. R.M. Khusnutdinoff, C. Cockrell, O.A. Dicks et al, Phys. Rev. B **101**, 214312 (2020).
5. T.B. Massalski, J.L. Murray, K.H. Bennet, H. Baker, *Binary Alloy Phase Diagrams* (Ohio, Metals Park, American Society for Metals, 1986).
6. Y. Mishin, Acta Mat. **52**, 1451 (2004).
7. G. Bonny, R.C. Pasianot, L. Malerba, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **17**, 025010 (2009).
8. M.E. Blodgett, T. Egami, Z. Nussinov, K.F. Kelton, Sci. Rep. **5**, 13837 (2015).
9. Y. Rosenfeld, J. Phys.: Condens. Matter **11**, 5415 (1999).