

Динамические процессы в жидком алюминии вблизи точки плавления: теория и компьютерное моделирование¹

Хуснутдинов Рамиль Миннегаязович

аспирант

Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет, Казань, Россия

E-mail: khrm@theory.kazan-spu.ru;

khrm@mail.ru

Выполнены теоретические и молекулярно-динамические исследования жидкого алюминия вблизи точки плавления при температуре $T=1000\text{K}$. На основе техники рекуррентных соотношений развита микроскопическая теория для описания динамических процессов в жидком алюминии. Результаты теоретических расчетов и компьютерного моделирования молекулярной динамики для спектров динамического структурного фактора сравниваются с экспериментальными данными по неупругому рассеянию рентгеновских лучей.

Введение

Динамические релаксационные процессы в неупорядоченных конденсированных средах тесно связаны с деталями межчастичного взаимодействия. Несмотря на многочисленные экспериментальные и молекулярно-динамические исследования природа этих процессов остается не выясненной до сих пор. Знание потенциалов межчастичного взаимодействия позволило бы точно установить механизмы таких динамических процессов как высокочастотная релаксация в жидкостях и стеклах, природу положительной дисперсии скорости звука вне гидродинамической области и т.д. на микроскопическом уровне. Однако получение точных и реалистичных потенциалов составляет известную проблему. Установлено, что аналитические выражения для потенциалов межчастичного взаимодействия содержат большое количество различных величин, которые необходимы для адекватного и реалистичного описания веществ при различных условиях (геометриях, структурах, термодинамических фазах). Такие потенциалы состоят из большого количества функций сложным образом связанных между собой.

Результаты

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования молекулярной динамики частиц с «клеевым» потенциалом [1], с целью проверки применимости данного потенциала к описанию динамических процессов в жидком алюминии вблизи температуры плавления. Исследуемая система состояла из $N=4000$ частиц при температуре $T=1000\text{K}$ с числовой плотностью $n=0.052763\text{\AA}^{-3}$ в кубической ячейке ($L=42.32\text{\AA}$) с периодическими граничными условиями. Для описания динамических процессов развита микроскопическая теория в рамках подхода рекуррентных соотношений [2]. Полученные результаты теоретических расчетов и компьютерного моделирования молекулярной динамики для спектров динамического структурного фактора жидкого алюминия при температуре $T=1000\text{K}$ находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по неупругому рассеянию рентгеновских лучей [3].

Литература

1. Liu X.-Y., Ercolessi F., and Adams J.B. (2004) Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. №12 (4) p. 665–670.

¹ Тезисы доклада основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 05-02-16639-а) и гранта Министерства Образования и Науки Российской Федерации (грант РНП № 2.1.1.741).

2. Mokshin A.V., Yulmetyev R.M., Khusnutdinoff R.M., and Hänggi P. (2007) Analysis of the dynamics of liquid aluminium: recurrent relation approach // J. Phys.: Condens. Matter №19 (4) p. 046209 (1-16).
3. Scopigno T., Balucani U., Ruocco G., and Sette F. (2000) Collective dynamics of liquid aluminum probed by inelastic x-ray scattering // Phys. Rev. E №63 (1), 011210 (1-7).