

## ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА РАСПЛАВА НИКЕЛЯ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ И МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Хуснутдинов Р.М.<sup>1,2,\*</sup>, Хайруллина Р.Р.<sup>1</sup>, Мокшин А.В.<sup>1,2</sup>, Суслов А.А.<sup>2</sup>,  
Ладьянов В.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>2</sup>Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,

Ижевск, Россия

\* [khrm@mail.ru](mailto:khrm@mail.ru)

Для переохлажденных переходных металлов характерно отсутствие дальнего порядка и наличие специфического ближнего порядка в расположении атомов. Так, наличие плеч и уширений во втором максимуме экспериментально измеряемой величины – в статическом структурном факторе  $S(k)$  – обычно интерпретируется как проявление икосаэдрического (идеального или искаженного) ближнего порядка. Икосаэдрический ближний порядок представляет собой структуру с пятилучевой симметрией в расположении атомов, что обуславливает возможность достижения системой глубокого переохлаждения. Известно, что структура переохлажденных переходных металлов характеризуется сложными многогранниками Франка-Каспера с координационными числами  $z=14-16$ . Ближний структурный порядок таких расплавов представляет научный интерес, поскольку считается, что локальная структура расплавов оказывает сильное влияние на его микроскопическую коллективную динамику, транспортные свойства и стеклообразующую способность.

В работе представлены результаты исследования локальных структурных особенностей, микроскопической коллективной динамики и транспортных свойств равновесного и переохлажденного расплава никеля. Проведены комплексные исследования соответствующих физических свойств расплава никеля с использованием крупномасштабных численных расчетов, рентгеноструктурного анализа и экспериментов по вискозиметрии. Обнаружено хорошее согласие результатов рентгеноструктурного анализа для равновесного расплава никеля с результатами моделирования и экспериментальными данными по дифракции нейтронов. Установлено, что в жидком никеле вклад парной энтропии в избыточную конфигурационную энтропию составляет ~60% в высокотемпературной области и ~80% вблизи и ниже температуры плавления. Было обнаружено хорошее совпадение наших экспериментальных результатов по вискозиметрии с другими известными экспериментальными данными и результатами моделирования транспортных характеристик (коэффициентов самодиффузии и вязкости) расплава никеля в широком диапазоне температур. Показано, что результаты моделирования и экспериментальные данные корректно воспроизводятся модифицированным соотношением Стокса-Эйнштейна, полученным в рамках масштабных преобразований Розенфельда.

*Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 22-22-00508).*