

**XX Всероссийская школа-конференция молодых ученых  
"Проблемы физики твердого тела и высоких давлений"**

**Сочи, пансионат "Буревестник  
16 - 26 сентября 2021г.**

**ТЕЗИСЫ**

**Москва, ФИАН 2021**

нанометров. С увеличением размеров частиц в них накапливаются напряжения, приводящие к потере устойчивости. В то же время икосаэдрические и звездчатые кристаллы материалов с высокими упругими модулями (В, В<sub>6</sub>О, В<sub>х</sub>С и алмаз) могут сохраняться до размеров в десятки микрометров, что подтверждается нашими результатами. Одной из причин этого является аккомодация углового несоответствия за счет дефектов решетки у двойниковых границ. Морфология полученных нами кристаллов карбида бора и алмаза объясняется реализацией при росте механизма циклического двойничкования, который чаще всего наблюдается в кристаллах с гранецентрированной кубической или кубической алмазной решеткой при низкой энергии двойниковых границ. В идеале кристаллы состоят из равноразмерных субъединиц с общей осью пятикратной симметрии и имеют форму декаэдра (пятиугольная бипирамида), икосаэдра или пятилучевой звезды. Субблоки регулярной решетки не могут образовать полную заполняющую пространство структуру. Например, для декаэдра остается угловое несоответствие 7,35°. Поэтому кристаллы, формирующиеся по механизму циклического двойничкования, имеют псевдопятую симметрию, но не являются псевдокристаллами.

#### Литература

I. V. P. Filonenko, P. V. Zinin, I. P. Zibrov, etc. Crystals. **8**, 448, 2018

### ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ РАВНОВЕСНОГО И ПЕРЕОХЛАЖДЕННЫХ РАСПЛАВОВ НИКЕЛЯ

Хайруллина Р.Р.\*, Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В.  
Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Институт физики  
\*e-mail: raniya-art@mail.ru

Переохлажденные переходные металлы характеризуются отсутствием дальнего порядка и наличием специфического ближнего порядка в расположении атомов. Так, наличие плеч и уширений во втором максимуме в экспериментально-измеряемой величине – в

статическом структурном факторе  $S(k)$  – принято трактовать как проявление икосаэдрического (идеального или искаженного) ближнего порядка (ISRO – *Icosahedral Short-Range Order*). Икосаэдрический ближний порядок представляет собой структуры с пятилучевой симметрией в расположении атомов, что может обуславливать возможность достижения системой глубоких переохлаждений.

В настоящей работе исследуются локальные структурные особенности равновесного и переохлажденного расплавы никеля при различных протоколах охлаждения ( $\gamma \in [10^{10}, 10^{11}]$  К/с) с целью выяснения механизма образования икосаэдрического ближнего порядка в чистых  $3d$ -переходных металлах. Никель представляет собой типичный  $3d$ -переходный металл, который при температурах выше температуры плавления  $T_m$  и атмосферном давлении, характеризуется жидкой фазой высокой плотности. Как и остальные высокоплотные жидкости, при температурах ниже  $T_m$  и достаточно высоких скоростях охлаждения ( $\gamma \geq 1.5 \cdot 10^{13}$  К/с), никель формирует метастабильные переохлажденные состояния [1]. Эксперименты с применением бесконтейнерных методов охлаждения установили возможность глубокого переохлаждения никеля вплоть до  $\Delta T_s = 480$  К [2]. С учетом температуры плавления никеля ( $T_m = 1728$  К) последнее значение дает переохлаждение  $\Delta T_s / T_m \approx 0.28$ , что является достаточно большой величиной для чистых металлов с относительно высокой температурой плавления [3]. В отличие от жидких щелочных металлов, где межатомные взаимодействия достаточно корректно воспроизводятся простыми сферически-симметричными псевдопотенциалами, жидкие переходные металлы, характеризуются сложными многочастичными взаимодействиями. Так, характер межатомного взаимодействия в переходных металлах обуславливается присутствием  $d$ -орбитальных электронов, которые гибридизуются с  $s$ -орбитальными электронами [4]. Как результат, ближний структурный порядок в жидких переходных металлах характеризуется рядом специфических особенностей и сложным набором корреляционных длин [5]. Недавние молекулярно-динамические исследования выявили наличие в переохлажденных расплавах и аморфных металлических сплавах так называемые искаженные икосаэдрические структуры [4,5]. Было установлено, что структура переохлажденных переходных металлов характеризуется сложными многогранниками Франка-Каспера с координационными числами  $z = 14 \div 16$ . Ближний структурный порядок таких расплавы

является предметом научного интереса, поскольку считается, что локальная структура расплавов оказывает заметное влияние на ее микроскопическую коллективную динамику, транспортные свойства, аморфообразующую способность и др.

Комплексные исследования равновесных свойств расплавов никеля были выполнены с помощью крупномасштабного моделирования молекулярной динамики, структурного и кластерного анализа. Найдено хорошее согласие результатов моделирования для равновесного расплава никеля с данными рентгеноструктурного анализа. Установлено, что переохлажденные расплавы никеля не содержат каких-либо идеальных или искаженных кластеров с икосаэдрической (5-лучевой) симметрией. Также было установлено, что кристаллизация никеля при достаточно высоких скоростях охлаждения ( $\gamma \in [10^{10}, 10^{11}] \text{K/s}$ ) осуществляется по поликристаллическому сценарию с образованием кристаллических кластеров с ГЦК и ГПУ симметриями.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект № 19-12-00022).

#### Литература

1. F. Li, X.J. et al; *Intermetallics* **19**, 630, **2011**
2. R. Willnecker, D.M. Herlach et al, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1339, **1986**
3. D.V. Louzguine-Luzgin et al, *J. Chem. Phys.* **151**, 124502, **2019**
4. D.K. Belashchenko, *Phys. Usp.* **56**, 1176, **2013**
5. A.V. Mokshin, R.M. Khusnutdinoff, B.N. Galimzyanov, V.V. Brazhkin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 4122, **2020**