

## Локальные структурные особенности и микроскопическая коллективная динамика расплавов никель-фосфор

Хайруллина Р.Р.<sup>1</sup>, Хуснутдинов Р.М.<sup>1,2</sup> и Мокшин А.В.<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup>Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр УрО РАН, Ижевск, Россия

E-mail: raniya-art@mail.ru

В работе исследуются локальные структурные особенности, микроскопическая коллективная динамика и транспортные свойства бинарного металлического расплава никель-фосфор для широкой области значений температур, включая область равновесной жидкой фазы и переохлажденного расплава. Моделирование расплавов  $Ni_{(100-x)}P_x$  (для составов  $x=0, 10, 20, 30, 40$  и  $50$  ат.%) выполнялось в  $NpT$ -ансамбле при давлении  $p=1.0$  бар для диапазона температур  $T=[1200; 2000]$  К. Рассчитанные структурные характеристики (парная функция распределения и статический структурный фактор) находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по дифракции рентгеновских лучей. На основе расчета спектров микроскопического потока найдены законы дисперсии продольных и поперечных акустико-подобных коллективных мод. Установлено, что температурные зависимости ширины щели в законе дисперсии поперечных акустико-подобных коллективных мод  $k_{\text{gap}}(T)$  хорошо воспроизводятся линейными зависимостями. Выполнено сопоставление экспериментальных данных по вискозиметрии и результатов моделирования атомарной/молекулярной динамики с целью уточнения данных по вязкости, а также по выявлению особенностей квазитвердотельного поведения в бинарных металлических расплавах. Результаты моделирования для концентрационных и температурных зависимостей вязкости расплавов никель-фосфор находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Выполнена численная оценка вклада парной корреляционной энтропии в конфигурационную энтропию в бинарных металлических расплавах. Установлено, что транспортные характеристики расплавов никель-фосфор при различных составах хорошо воспроизводятся квазиуниверсальными моделями Дзугутова и Розенфельда. Показано, что температурные зависимости вязкости описываются моделью вязкости, предложенной в работе [2].

*Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета. Работа поддержана Российским Научным Фондом (Проект №19-12-00022).*

### Литература

1. H.W. Sheng, E. Ma, M. J. Kramer, JOM **64**, 856 (2012).
2. M.E. Blodgett, T. Egami, Z. Nussinov, K.F. Kelton, Sci. Rep. **5**, 13837 (2015).