

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ТЕОРИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Международная Конференция

Дубна, Октябрь 17-22, 2022

Сборник Аннотаций

Дубна • 2022

Программный Комитет

А.М. Поволоцкий	ОИЯИ, Дубна
Е. Аницаш	ОИЯИ, Дубна
Д.Н. Аристов	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ, Санкт-Петербург
М.М. Глазов	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
О.В. Кибис	НГТУ, Новосибирск
Е.А. Кочетов	ОИЯИ, Дубна
Ю.М. Письмак	СПбГУ, Санкт-Петербург
А.В. Рожков	ИТПЭ, Москва
П.Б. Сорокин	НИТУ МИСиС, Москва
А.К. Щекин	СПбГУ, Санкт-Петербург

Организационный Комитет

В.А. Осипов	–сопредседатель
М. Гнатич	–сопредседатель
В.Л. Катков	–ученый секретарь
Е.Н. Русакович	–секретарь
Г.А. Калагов	
К.В. Куликов	
Н.М. Лебедев	
Л. Мижишин	
Ю.Г. Молотков	
О.Г. Садыкова	

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СПЛАВЕ $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Б.Н. Галимзянов, М.А. Доронина, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

bulatgnmail@gmail.com

Бинарный сплав $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ обладает ярко выраженной способностью образовывать объемное металлическое стекло, что делает его привлекательным для изготовления конструкционных материалов [1]. Функциональные свойства этого сплава зависят от термодинамических условий, в которых синтезируется и/или используется сплав. Поэтому для правильного определения функциональных возможностей этого сплава необходимо знать детальную (p , T) фазовую диаграмму.

В настоящей работе на основе данных молекулярно-динамических расчетов впервые определена (p , T) фазовая диаграмма сплава $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ для широкого термодинамического диапазона. Определены температура ликвидуса T_l и температура стеклования T_g как функции давления p . Мы показали, что полученные зависимости $T_l(p)$ и $T_g(p)$ воспроизводятся известными эмпирическими уравнениями Симона-Глатцеля. Выявлена область фазового расслоения, которая наблюдается при давлениях выше $1 \cdot 10^7$ атм. В этой области Nb находится в жидком состоянии, в то время как Ni образует перколяционную кристаллическую структуру. Этот результат имеет важное значение, так как показывает, что давление является одним из основных термодинамических параметров, позволяющих управлять фазовыми превращениями в сплаве $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ [2]. Поэтому результаты настоящей работы могут стать отправной точкой для изучения фазовых переходов в системе Ni-Nb с различной концентрацией атомов Ni.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект №19-12-00022-П). АВМ выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики «Базис» (№ 20-1-2-38-1).

References

- [1] L. Xia, W.H. Li, S.S.Fang, B.C. Wei, Y.D. Dong *Binary Ni–Nb bulk metallic glasses*. J. Appl. Phys., **99**, 026103 (2006)
- [2] B.N. Galimzyanov, M.A. Doronina, A.V. Mokshin *Excellent glass former $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ crystallizing under combined shear and ultra-high pressure*. J. Non-Cryst. Solids, **572**, 121102 (2021)