

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
ДАГЕСТАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА  
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

# **ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

## **СБОРНИК ТРУДОВ**

международной конференции  
посвященной 90-летию Дагестанского  
государственного университета

12-17 сентября 2021 г., Махачкала

Махачкала 2021

## ЛОКАЛЬНЫЕ СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА РАВНОВЕСНОГО И ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА НИКЕЛЯ

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

Переохлажденные переходные металлы представляют собой класс жидкостей, обладающие специфическим ближним порядком во взаимном расположении атомов. Так, локальная структура таких металлов характеризуется многогранниками Франка-Каспера с координационными числами  $z=14\div 16$ , а также сложным набором корреляционных длин, которые, в свою очередь, определяют её микроскопическую атомарную динамику.

В настоящей работе исследуются локальные структурные особенности и транспортные свойства равновесного и переохлажденного расплава никеля с помощью моделирования молекулярной динамики. Моделирование никеля выполнялось в  $NpT$ -ансамбле для диапазона температур  $T=[1200; 3000]$ К при давлении  $p=1.0$  бар. Рассматривались две системы, взаимодействия, между атомами которых осуществлялось с помощью потенциалов «погруженного атома» (ЕАМ-потенциалов) [1] и [2]. Моделируемые системы состояли из  $N=32000$  атомов, заключенные в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Расплавы с заданными температурами были получены быстрым охлаждением (со скоростью охлаждения  $\gamma=10^{10}$  К/с) из высокотемпературного равновесного состояния при  $T=3000$ К. Цель настоящего исследования заключалась в уточнении данных по вязкости и самодиффузии равновесного и переохлажденного никеля, а также в определении влияния локальных структурных особенностей на транспортные свойства и коллективную динамику в жидких переходных металлах.

Для исследования локальных структурных особенностей равновесного и переохлажденного никеля были рассчитаны статический структурный фактор, функции радиального и углового распределения. На рис. 1 представлены функция радиального распределения  $g(r)$ , статический структурный фактор  $S(k)$  и функция углового распределения  $P(\theta)$  ближайших соседей в расплаве никеля при различных температурах, полученные моделированием с ЕАМ-потенциалом [1] и [2], соответственно. Из рисунка видно, что оба потенциала приводят к подобным результатам по структуре расплава никеля в широком диапазоне температур. Видно, что с уменьшением температуры в функциях радиального распределения  $g(r)$  не наблюдаются какие-либо особенности, которые были бы характерны для

кристаллических и аморфных систем (появление экстремумов, расщепление второго пика и др.). В то же время, второй максимум статического структурного фактора  $S(k)$  характеризуется слабым плечом, который становится более выраженным с переохлаждением. Такая особенность второго максимума в  $S(k)$  была обнаружена и в ряде других переходных металлов ( $Fe$ ,  $Ti$ ,  $Zr$ ) и обычно связывается с так называемым икосаэдрическим (идеальным или искаженным) ближним порядком. Тот факт, что ближний порядок изменяется с охлаждением системы, также подтверждается формами функций углового распределения  $P(\theta)$  при различных температурах ( $T=3000K$  для стабильного жидкого состояния и  $T=1200K$  для переохлажденного расплава), как показано на рис. 1 (с). Как видно из рисунка, переохлажденный расплав характеризуется более выраженными максимумами в функции распределения  $P(\theta)$ , а также дополнительным пиком при  $\theta=150^\circ$ , что указывает на сложный политетраэдрический порядок.

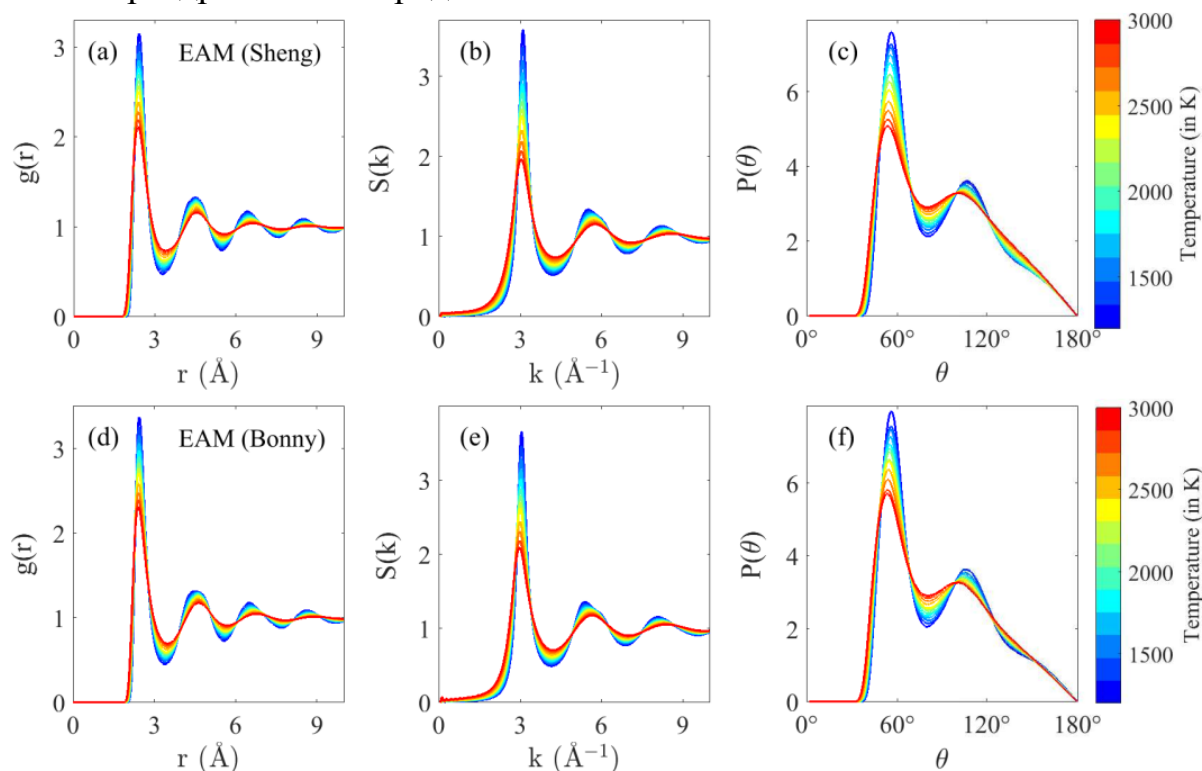


Рис. 1. Функция радиального распределения  $g(r)$  (a,d), статический структурный фактор  $S(k)$  (b,e) и функция углового распределения  $P(\theta)$  (c,f) ближайших соседей в расплаве никеля при различных температурах. Верхняя колонка представляет результаты моделирования с потенциалом [1], нижняя колонка – результаты моделирования с потенциалом [2].

Сравнение результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными по самодиффузии  $D$  расплава никеля представлено на левой колонке рис. 2. Как видно из рисунка, результаты наших расчетов имеют подобную температурную зависимость для значений коэффициента  $D$ . В то же время, результаты моделирования для обоих

потенциалов [1] и [2] несколько переоценивают имеющиеся экспериментальные значения [3,4] на ~36% и ~20%, соответственно. На правой колонке рис. 2 представлены результаты моделирования в сравнении с экспериментальными данными [5,6] для температурной зависимости коэффициента сдвиговой вязкости  $\eta$ . Из рисунка видно, что рассчитанные значения вязкости находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по вискозиметрии. В то же время, некоторые расхождения полученных результатов с экспериментальными данными [3,4], которые наблюдаются в области низких температур, могут объясняться различиями в специфике протоколов охлаждения моделирования и эксперимента (скорости охлаждения, времени выдержки и др.).

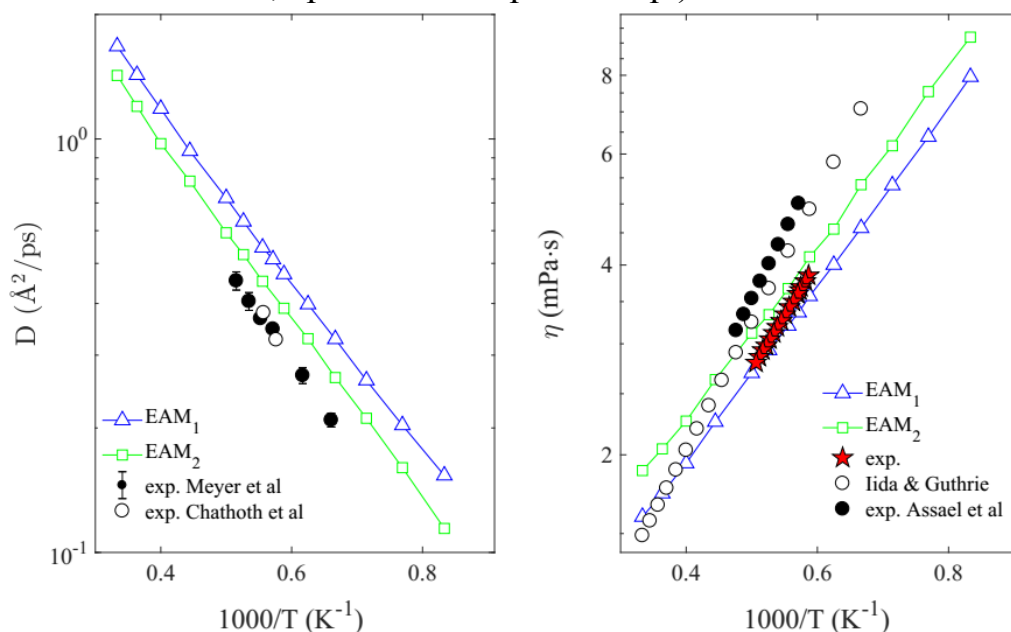


Рис. 2. Левая колонка: Температурная зависимость коэффициента самодиффузии расплава никеля: маркеры (●●●) и (ooo) представляют экспериментальные данные [3] и [4], соответственно. Правая колонка: Зависимость сдвиговой вязкости жидкого никеля от обратной температуры: маркеры (звездочки) соответствуют экспериментальным результатам; (ooo) и (●●●) – экспериментальные данные [5] и [6], соответственно. В обеих колонках маркеры ( $\Delta\Delta\Delta$ ) и ( $\square\square\square$ ) обозначают результаты моделирования молекулярной динамики с EAM-потенциалами [1] и [2], соответственно.

Для выявления корреляций между транспортными характеристиками и структурными особенностями многочастичной неупорядоченной системы мы воспользовались масштабными преобразованиями, предложенные Дзугутовым, Ли и Розенфельдом<sup>1</sup> [7]. На рис. 3 представлены приведенные значения коэффициентов самодиффузии и вязкости для расплава никеля в зависимости от избыточной конфигурационной энтропии. Как видно из рисунка, результаты моделирования с обоими потенциалами показывают корреляцию между транспортными характеристиками и структурными

<sup>1</sup> Индексами Z, L и R обозначены масштабные преобразования Дзугутова, Ли и Розенфельда, соответственно.

особенностями расплава никеля для широкой области значений температур. Установлено, что наилучшее описание зависимостей  $D^*(S_{ex})$  и  $\eta^*(S_{ex})$  осуществляется в рамках масштабных преобразований Дзугутова и Ли, в то время как масштабные преобразования Розенфельда приводят к некоторым расхождениям результатов моделирования с теоретическими предсказаниями.

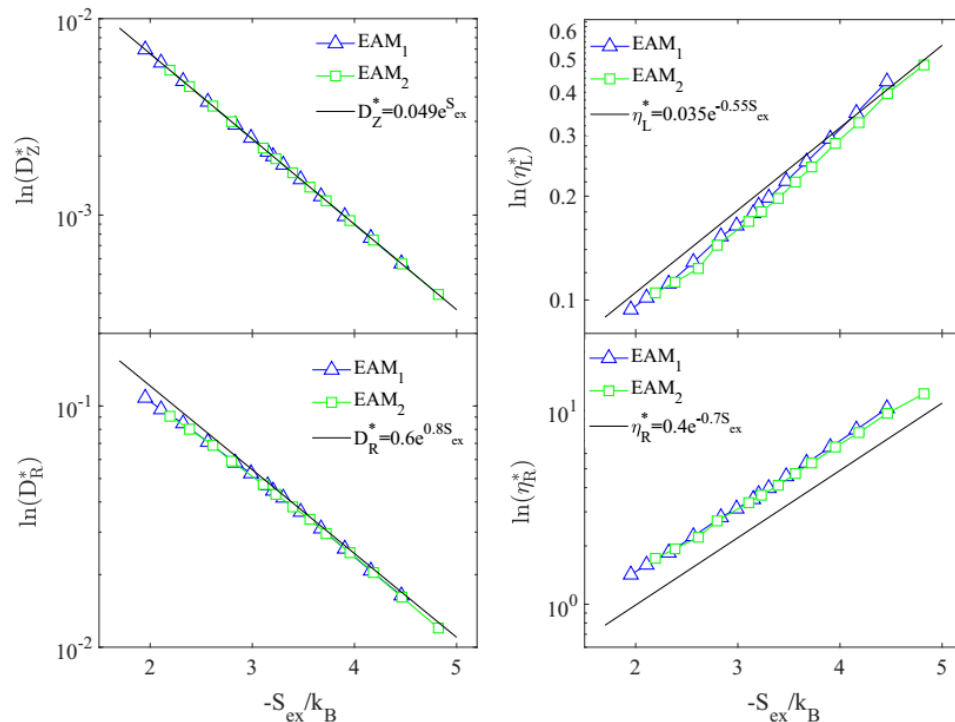


Рис. 3. Левая колонка: Зависимость приведенного коэффициента самодиффузии от избыточной энтропии. Сплошные линии (сверху) и (снизу) представляют масштабные соотношения Дзугутова и Розенфельда, соответственно. Правая колонка: Приведенная вязкость как функция от избыточной энтропии. Сплошные линии (сверху) и (снизу) представляют масштабные соотношения Ли и Розенфельда, соответственно. Маркеры ( $\Delta\Delta\Delta$ ) и ( $\square\square\square$ ) представляют результаты моделирования молекулярной динамики с EAM-потенциалами [1] и [2], соответственно.

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

- [1] H.W. Sheng, E. Ma, M. J. Kramer, JOM **64**, 856 (2012).
- [2] G. Bonny et al, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **17**, 025010 (2009).
- [3] A. Meyer, S. Stüber et al, Phys. Rev. B **77**, 092201 (2008).
- [4] S.M. Chathoth, A. Meyer et al, Appl. Phys. Lett. **85**, 4881 (2004).
- [5] T. Iida, R.I.L. Guthrie, *The thermophysical properties of metallic liquids*. (Oxford: Oxford Press, 2015).
- [6] M.J. Assael, A.E. Kalyva et al, High Temp.-High Press., **41**, 161 (2012).
- [7] R.M. Khusnutdinoff, A.V. Mokshin, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 104006 (2021).