



ТЕЗИСЫ

XII Международной конференции

«ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ»

памяти академика Г.В. Курдюмова

ФПК-2022

24 – 27 октября 2022 г.
г. Черноголовка, Россия

Российская Академия наук
Министерство науки и высшего образования РФ
Научный Совет РАН по физике конденсированных сред.
Межгосударственный координационный совет по физике прочности
и пластичности материалов
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
Институт физики твердого тела РАН
Научный Центр металловедения и физики металлов им. Г.В. Курдюмова
ФГУП "ЦНИИчермет им. И.П. Бардина"

Двенадцатая Международная Конференция
«Фазовые превращения и
прочность кристаллов»,
памяти академика Г.В. Курдюмова

Под редакцией д.ф.-м.н. Б.Б.Страумала

XII International G.V. Kurdjumov conference
"Phase transformations and strengths of the crystals"

Черноголовка, 24 – 27 октября 2022 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Черноголовка
2022

Фазовые превращения и прочность кристаллов: сб. тезисов XII Международной конференции (24 – 27 октября 2022 года, Черногоровка) / под ред. Б.Б. Страумала. – Черногоровка, 176 с. – ISBN 978-5-6045956-2-6.

ISBN 978-5-6045956-2-6



9 785604 595626

© Российская Академия наук, 2022
© Страумал Б.Б. (редактор), 2022

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

Хуснутдинов Р.М.^{1,2,*}, Хайруллина Р.Р.¹, Мокшин А.В.^{1,2}, Суслов А.А.²,
Ладьянов В.И.²

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,

Ижевск, Россия

* 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).