локальные структурные особенности и микроскопическая динамика расплава никеля: экспериментальное исследование и молекулярно-динамическое моделирование

Р.М. Хуснутдинов1,2,\*), Р.Р. Хайруллина1), А.В. Мокшин1,2), А.А. Суслов2), В.И. Ладьянов2)

1) Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

2) Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

\*)e-mail: khrm@mail.ru

В работе представлены результаты исследования локальных структурных особенностей и транспортных свойств равновесного и переохлажденного расплава никеля. Проведены комплексные исследования соответствующих физических свойств расплава никеля с использованием крупномасштабных численных расчетов, рентгено-структурного 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).*