

УДК 539.2

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

© 2023 г. Р. М. Хуснутдинов^{1, 2, *}, Р. Р. Хайруллина¹, А. Л. Бельтюков^{1, 2},
И. В. Стерхова^{1, 2}, А. А. Суслов², В. И. Ладынов², А. В. Мокшин^{1, 2}

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

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

*E-mail: khrm@mail.ru

Поступила в редакцию 04.05.2022 г.

После доработки 07.07.2022 г.

Принята к публикации 13.10.2022 г.

В работе исследуются локальные структурные особенности, микроскопическая динамика и транспортные свойства равновесного и переохлажденного расплава никеля. Комплексное изучение соответствующих физических свойств расплава никеля выполнено с помощью крупномасштабных молекулярно-динамических исследований, экспериментов по дифракции рентгеновских лучей и по вискозиметрии методом крутильных колебаний. Получено хорошее согласие результатов рентгеноструктурного анализа равновесного расплава никеля с результатами моделирования молекулярной динамики при различных ЕАМ-потенциалах и экспериментальными данными по дифракции нейтронов. Установлено, что в жидком никеле вклад парной корреляционной энтропии в избыточную конфигурационную энтропию составляет ~60% в высокотемпературной области и ~80% в окрестности и ниже температуры плавления. Обнаружено хорошее согласие результатов моделирования транспортных характеристик (коэффициентов самодиффузии и вязкости) расплава никеля в широкой области температур с имеющимися экспериментальными данными и результатами по вискозиметрии. Показано, что результаты моделирования, полученные со всеми рассмотренными потенциалами межатомного взаимодействия, корректно воспроизводятся модифицированным соотношением Стокса–Эйнштейна, полученным в рамках масштабных преобразований Розенфельда.

DOI: 10.31857/S0040364423020096

ВВЕДЕНИЕ

Знание транспортных свойств, таких как вязкость и диффузия равновесных и переохлажденных металлических расплавов, важно как для фундаментальных теорий, так и для технологических приложений [1]. Например, процессы переноса играют ключевую роль в различных методах обработки материалов, включающих процессы затвердевания и стеклообразования, а также в способах управления скоростью химических реакций. Измерение коэффициента самодиффузии жидкости представляет собой сложную задачу из-за высокой чувствительности явления к внешним возмущениям, например эффектам конвекции. В то же время, вопреки наличию большого количества экспериментальных методов определения вязкости жидкостей, методы, подходящие для высокотемпературных расплавов, таких как жидкие переходные металлы и жидкие полупроводники, ограничены низкой вязкостью металлов, их химической реакционной способностью и высокими температу-

рами плавления [2]. При этом, несмотря на экспериментальные ограничения в измерении коэффициентов переноса, предпринимаются попытки описать эти свойства с помощью различных теорий [3–7] и компьютерного моделирования [8–12]. Данные исследования в некоторой степени расширили представления о механизмах протекания транспортных процессов в жидкостях. Например, универсальные законы масштабирования, предложенные Дзугутовым [13] и Розенфельдом [14], позволили понять свойства переноса с точки зрения структуры и термодинамики равновесной жидкости. Связи между структурой, термодинамикой и транспортными свойствами, устанавливаемые универсальными законами подобия, облегчают изучение транспортных свойств жидких металлов с высокими температурами плавления, таких как, например, жидкие переходные металлы. Одновременно не до конца понятно, как коэффициенты переноса зависят от строения и термодинамики переохлажденных жидкостей. Поэтому вопрос о том, можно ли предсказывать

динамические свойства по термодинамическим или структурным особенностям переохлажденной жидкости, является интересным, но не столь очевидным [3]. Таким образом, задача нахождения соотношений между транспортными коэффициентами и структурными свойствами переохлажденной жидкости остается одной из самых сложных задач в области теплофизики конденсированных сред [15].

В данной работе выполнены рентгеноструктурный анализ, экспериментальные измерения вязкости и моделирование молекулярной динамики расплава никеля в широкой области температур, включая равновесное жидкое состояние и фазу переохлажденного расплава. Цель настоящего исследования заключается 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.

ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В данном разделе представлено описание экспериментальных методик по определению локальных структурных особенностей и измерению вязкости расплава никеля с помощью экспериментов по дифракции рентгеновских лучей и по вискозиметрии.

Рентгеноструктурный анализ. Рентгеноструктурный анализ расплава никеля был выполнен на высокотемпературном рентгеновском θ – θ -дифрактометре ДАРВ в M_0K_{α} -излучении при использовании графитового монохроматора на первичном пучке при температурах 1773, 1823, 1873 и 1923 К. Съемка проводилась в корундовом тигле в атмосфере очищенного гелия после предварительного вакуумирования до 10^{-6} мм рт.ст. Измерения выполнялись в режиме набора импульсов с дискретным шагом по 2θ : 0.5° в интервале 5° – 18° , 0.2° в интервале 18° – 21° , 0.5° в интервале 21° – 45° , 1° в интервале 45° – 90° . Время съемки в точке (60 с) подбирались таким образом, чтобы статистическая погрешность на “хвосте” кривой не превышала 1%. Температура расплава поддерживалась с точностью ± 3 К с помощью высокочастотного регулятора температуры ВРТ-3. Полученные экспериментальные кривые интенсивности сглаживались методом Савицкого–Голяя полиномом пятого порядка по 5–20 точкам (в зависимости от интервала съемки) с последующим расчетом структурного фактора и функции распределения с использованием программы PDFgetX3 [16].

Вискозиметрия. Кинематическая вязкость ν расплава никеля измерялась методом крутильных колебаний [17] на автоматизированной установке с оптической системой регистрации [18]. Образцы расплава никеля получались в печи вискозимет-

ра в атмосфере высокочистого гелия в температурном диапазоне $T = [1704; 1974]$ К (температура плавления $T_m = 1728$ К), который охватывает области равновесной жидкой фазы и переохлажденного состояния¹. Температурные зависимости вязкости получены в режимах нагрева и последующего охлаждения до начала кристаллизации расплава. При каждой температуре перед началом измерений проводилась изотермическая выдержка в течение 15 мин. Значения кинематической вязкости и погрешности ее определения вычислялись по методикам, изложенным в работах [19, 20]. Общая относительная погрешность определения вязкости не превышает 4% при погрешности единичного эксперимента не более 2%. Сдвиговая вязкость $\eta = \nu\rho$ пересчитана на основе экспериментальных данных о плотности расплава никеля [21].

ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование молекулярной динамики (МД) расплава никеля выполнялось в NpT -ансамбле при давлении $p = 1.0$ бар для диапазона температур² $T = [1200; 3000]$ К в программном комплексе LAMMPS [22]. Рассматривались две системы, взаимодействия между атомами которых осуществлялись с помощью потенциалов “погруженного атома” (EAM-потенциалов) [23] и [24] соответственно. Моделируемые системы состояли из $N = 32000$ атомов, заключенных в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Расплавы с заданными температурами были получены быстрым охлаждением из высокотемпературного равновесного состояния при $T = 3000$ К. Скорость охлаждения систем составила $\gamma = 1.0$ К/пс. Интегрирование уравнений движений атомов выполнялось с помощью алгоритма Верле в скоростной форме с временным шагом 1.0 фс [25]. Для приведения систем в состояние термодинамического равновесия программой было выполнено 1.5×10^7 временных шагов и 2×10^8 шагов для расчета временных корреляционных функций и коэффициентов переноса (диффузии и вязкости).

ТРАНСПОРТНЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ И УНИВЕРСАЛЬНЫЕ ЗАКОНЫ МАСШТАБИРОВАНИЯ

Масштабное соотношение Дзугутова для коэффициента самодиффузии. Дзугутов определил приведенный коэффициент самодиффузии следующим образом [13]:

$$D_z^* = \frac{D}{\Gamma\sigma^2}.$$

¹ Переохлаждение расплава никеля составило свыше 20 градусов.

² Переохлаждение расплавов никеля в численном эксперименте составило свыше 520 градусов.

Здесь Γ – частота столкновений, которая согласно теории Энскога определяется соотношением [26]

$$\Gamma = 4\sigma^2 g(\sigma) \rho \left(\frac{\pi k_B T}{m} \right)^{\frac{1}{2}},$$

где σ – эффективный диаметр твердой сферы (в реальных системах величина σ может определяться как положение первого максимума в функции радиального распределения частиц $g(r)$), ρ – концентрация частиц в системе, T – абсолютная температура, k_B – постоянная Больцмана, m – масса атома. В рамках данного подхода может быть получено следующее универсальное масштабное соотношение:

$$D_Z^* = 0.049e^{S_{ex}}. \quad (1)$$

Здесь S_{ex} – избыточная конфигурационная энтропия в единицах k_B , определяемая как разность энтропии жидкости и энтропии идеального газа при тех же значениях плотности ρ и температуры T

$$S_{ex}(\rho, T) \equiv S(\rho, T) - S_{id}(\rho, T).$$

Вследствие того, что жидкость является более упорядоченной, чем идеальный газ, избыточная конфигурационная энтропия – величина отрицательная. Энтропия S_{ex} может быть разложена по различным вкладам

$$S_{ex} = S_2 + S_3 + \dots = \sum_{n=2}^{\infty} S_n. \quad (2)$$

Здесь S_2, S_3, \dots, S_n – двух-, трех-, ..., n -частичные вклады в избыточную энтропию S_{ex} . Первые два члена в уравнении (2) определяются через функции радиального распределения двух- и трехчастичных вкладов [27]

$$S_2 = -2\pi\rho \int_0^{\infty} [g(r) \ln(g(r)) - (g(r) - 1)] r^2 dr, \quad (3)$$

$$S_3 = -\frac{4\pi^2 \rho^2}{3} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \left[g_3(r_1, r_2, r_3) \times \right. \\ \left. \times \ln \left(\frac{g_3(r_1, r_2, r_3)}{g_3(r_1)g_3(r_2)g_3(r_3)} \right) - g_3(r_1, r_2, r_3) - \right. \\ \left. - g(r_1) - g(r_2) - g(r_3) + g(r_1)g(r_2) + \right. \\ \left. + g(r_1)g(r_3) + g(r_2)g(r_3) + 1 \right] r_1 r_2 r_3 dr_1 dr_2 dr_3, \quad (4)$$

где трехчастичная функция распределения может быть приближено оценена в рамках суперпозиционного приближения Кирквуда [28]

$$g_3(r_1, r_2, r_3) \approx g_3(r_1, r_2) g_3(r_1, r_3) g_3(r_2, r_3). \quad (5)$$

Приближение $S_{ex} \approx S_2$ обычно применяется в случае систем, описываемых парными сферическими симметричными потенциалами, где вклад парной корреляционной энтропии S_2 в избыточную энтропию может достигать 80–90%. В то же время в системах, описываемых многочастичными потенциалами и потенциалами, содержащими

угловые зависимости, вклад парной энтропии S_2 в полную энтропию системы заметно уменьшается [29–31].

Закон масштабирования вязкости Ли. По аналогии с масштабными преобразованиями Дзугутова для самодиффузии жидкости, Ли с соавторами [32] определили редуцированный коэффициент сдвиговой вязкости как

$$\eta_L^* = \eta \frac{\sigma}{\Gamma m},$$

что позволило получить соотношение между вязкостью и избыточной энтропией в виде

$$\eta_L^* = 0.035e^{-0.55S_{ex}}. \quad (6)$$

Законы масштабирования Розенфельда. Масштабные преобразования Розенфельда для коэффициентов переноса базируются на макроскопических параметрах системы, определяемых по плотности ρ и температуре T . Такое описание становится возможным, когда в качестве масштабных единиц выступают среднее расстояние между

частицами $d = \rho^{-\frac{1}{3}}$ и тепловая скорость частицы $\vartheta = \left(\frac{k_B T}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$. Так, приведенные выражения для коэффициента самодиффузии D , вязкости η и теплопроводности λ принимают вид

$$D_R^* = D \frac{\rho^{\frac{1}{3}}}{(k_B/m)^{1/2}},$$

$$\eta_R^* = \eta \frac{\rho^{-\frac{2}{3}}}{(mk_B T)^{1/2}},$$

$$\lambda_R^* = \lambda \frac{\rho^{-\frac{2}{3}}}{k_B (k_B/m)^{1/2}}.$$

В соответствии с ними могут быть найдены выражения, связывающие транспортные коэффициенты с избыточной конфигурационной энтропией системы [14]:

$$D_R^* \approx 0.6e^{0.8S_{ex}}, \quad (7)$$

$$\eta_R^* \approx 0.2e^{-0.8S_{ex}}, \quad (8)$$

$$\lambda_R^* \approx 1.5e^{-0.5S_{ex}}.$$

В равновесных жидкостях для определения вязкости по коэффициенту самодиффузии (либо же, наоборот, величины самодиффузии через коэффициент вязкости) часто используется соотношение Стокса–Эйнштейна. В рамках масштабных преобразований Розенфельда соотношение Стокса–Эйнштейна для приведенных коэффициентов принимает вид [29]

$$D_R^* \eta_R^* = \frac{1}{c\pi}, \quad (9)$$

где c – некоторая безразмерная постоянная.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлены экспериментальные результаты по дифракции рентгеновских лучей для статистического структурного фактора $S(k)$ жидкого никеля при различных температурах в сравнении с результатами моделирования на основе двух потенциалов межатомного взаимодействия и экспериментальных данных по дифракции нейтронов. Статический структурный фактор $S(k)$ – измеряемая величина, которая определяется в экспериментах по дифракции нейтронов и рентгеновских лучей. Здесь k – волновое число. Как видно из рисунка, результаты рентгеноструктурного анализа, экспериментальные данные по дифракции нейтронов [33] и результаты моделирования молекулярной динамики с ЕАМ-потенциалами [23, 24] хорошо согласуются друг с другом и верно воспроизводят структурные особенности равновесного расплава никеля.

Коэффициент самодиффузии расплава никеля определялся на основе данных моделирования молекулярной динамики по соотношению Эйнштейна

$$D = \frac{1}{6N} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \frac{1}{t} \langle |r_i(t) - r_i(0)|^2 \rangle,$$

где $r_i(t)$ – радиус-вектор положения i -го атома в момент времени t , угловые скобки обозначают осреднение по ансамблю частиц и по временным выборкам. Величина коэффициента самодиффузии рассчиты-

валась в результате статистически осредненных измерений по 2000 независимых выборок.

Сдвиговая вязкость находилась с помощью соотношения Кубо–Грина [34]

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle \sigma_{\alpha\beta}(t) \sigma_{\alpha\beta}(0) \rangle dt, \quad (10)$$

где V – объем системы, $\sigma_{\alpha\beta}$ – недиагональные компоненты тензора напряжения. С учетом того, что при понижении температуры затухание автокорреляционной функции тензора напряжений замедляется, временной интервал, используемый при интегрировании в уравнении (10), увеличивался с 10 до 100 пс. Величина коэффициента сдвиговой вязкости η рассчитывалась в результате статистически осредненных измерений по 100 000 независимых выборок. Сравнение результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными по самодиффузии D расплава никеля представлено на рис. 2а. Результаты авторских расчетов имеют подобную температурную зависимость для значений коэффициента D . В то же время результаты моделирования для обоих потенциалов [23, 24] несколько превышают имеющиеся экспериментальные значения [35, 36] на ~36% и ~20% соответственно.

На рис. 2б представлены результаты вискозиметрии и моделирования молекулярной динамики, а также экспериментальные данные [37, 38] для температурной зависимости η . Рассчитанные значения вязкости находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами. Некоторые расхождения полученных результатов с экспериментальными данными [37, 38], которые наблюдаются в области низких температур, могут объясняться различиями в специфике протоколов

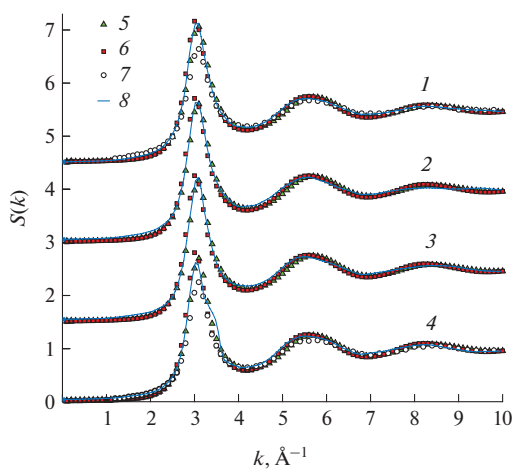


Рис. 1. Статический структурный фактор жидкого никеля при различных температурах: 1 – $T = 1923$ К, 2 – 1873, 3 – 1823, 4 – 1773; 5 – результаты моделирования с ЕАМ-потенциалами [23], 6 – [24]; 7 – экспериментальные данные по дифракции нейтронов при $T = 1765, 1905$ К [33]; 8 – экспериментальные результаты по дифракции рентгеновских лучей.

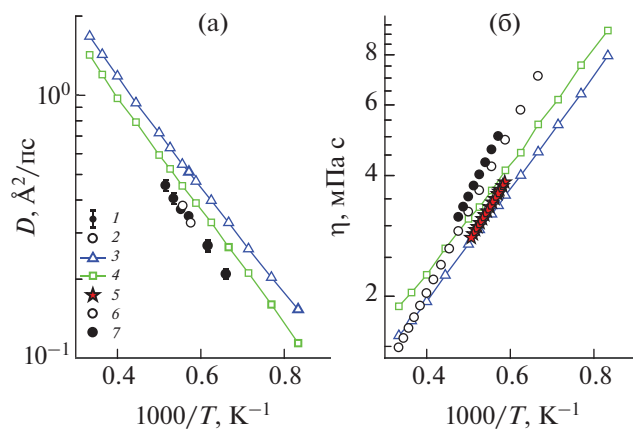


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента самодиффузии (а) расплава никеля: 1 – экспериментальные данные [35], 2 – [36], 3 – результаты моделирования молекулярной динамики с ЕАМ-потенциалами [23], 4 – [24]; (б) – зависимость сдвиговой вязкости жидкого никеля от обратной температуры: 5 – экспериментальные результаты данной работы, 6 – [37], 7 – [38].

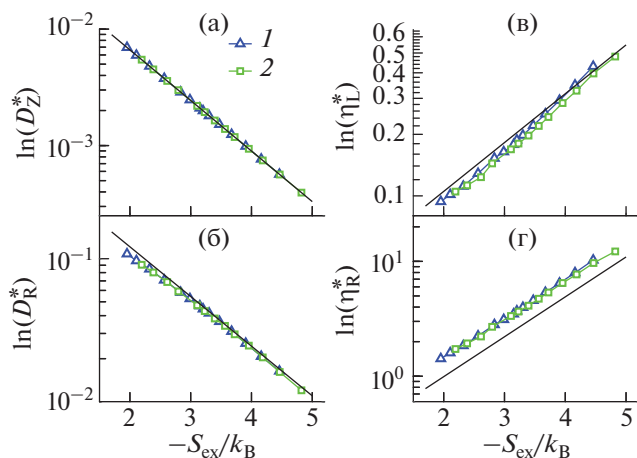


Рис. 3. Зависимости приведенного коэффициента самодиффузии от избыточной энтропии (а), (б): линии – расчет по (1), (7) соответственно; (в), (г) – приведенная вязкость как функция S_{ex} : линии – расчет по (6), (8); 1 – результаты моделирования молекулярной динамики с EAM-потенциалами [23], 2 – [24].

охлаждения при моделировании и в эксперименте (скорости охлаждения, время выдержки и др.).

На рис. 3 представлены результаты моделирования для редуцированных коэффициентов самодиффузии и вязкости равновесного переохлажденного никеля от избыточной конфигурационной энтропии, приведенные в соответствии с масштабными преобразованиями Дзугутова (1), Ли (6) и Розенфельда (7), (8). Энтропия системы рассчитывалась на основе данных моделирования молекулярной динамики с помощью соотношений (2)–(4). Трехчастичная функция распределения частиц рассчитана на основе парной корреляционной функции в рамках суперпозиционного приближения Кирквуда (5). Зависимость самодиффузии от конфигурационной энтропии хорошо описывается как масштабными преобразованиями Дзугутова, так и соотношением Розенфельда. В то же время вязкость, описываемая масштабными преобразованиями Ли, дает наилучшее согласие с результатами моделирования молекулярной динамики по сравнению с соотношениями Розенфельда.

На рис. 4а представлена температурная зависимость отношения двухчастичной корреляционной энтропии к полной энтропии системы. Видно, что в жидком никеле вклад парной корреляционной энтропии в избыточную конфигурационную энтропию составляет ~60% в высокотемпературной области и ~80% в окрестности и ниже температуры плавления.

Сравнение результатов моделирования с двумя EAM-потенциалами [23, 24] и теоретических расчетов (9) по модифицированному соотноше-

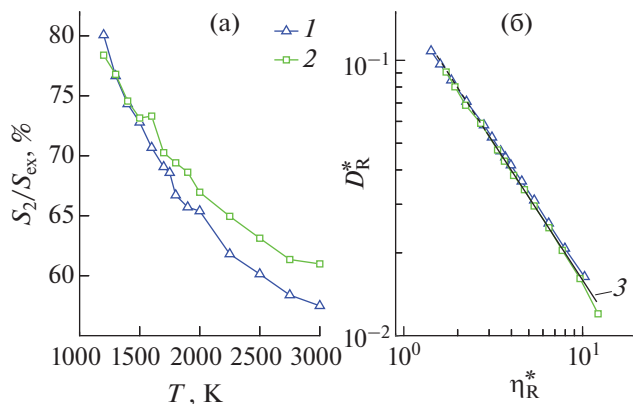


Рис. 4. Вклад двухчастичной корреляционной энтропии в избыточную энтропию системы (а), расчет по соотношению Стокса–Эйнштейна в рамках масштабных преобразований Розенфельда (б); 1 – результаты моделирования молекулярной динамики с EAM-потенциалами [23], 2 – [24]; 3 – результаты теоретических расчетов по (9) при $c = 2$.

нию Стокса–Эйнштейна в рамках масштабных преобразований Розенфельда представлено на рис. 4б. Установлено, что независимо от выбора потенциала межатомного взаимодействия результаты моделирования достаточно корректно описываются уравнением (9).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены крупномасштабные молекулярно-динамические исследования, рентгеноструктурный анализ и эксперименты по вискозиметрии равновесного и переохлажденного расплава никеля. Найдено хорошее согласие результатов рентгеноструктурного анализа равновесного никеля с результатами моделирования молекулярной динамики с различными EAM-потенциалами и экспериментальными данными по дифракции нейтронов. Рассчитаны парные и многочастичные вклады в избыточную конфигурационную энтропию системы. Установлено, что в жидком никеле вклад парной корреляционной энтропии в полную энтропию составляет ~60% в высокотемпературной области и ~80% в окрестности и ниже температуры плавления. Обнаружено хорошее согласие результатов моделирования коэффициентов самодиффузии и вязкости никеля в широкой области температур с имеющимися экспериментальными данными и результатами по вискозиметрии. Показано, что независимо от выбора потенциала межатомного взаимодействия результаты моделирования достаточно корректно описываются модифицированным соотношением Стокса–Эйнштейна, полученным в рамках масштабных преобразований Розенфельда.

Молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского феде-

рального университета. Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 22–22–00508).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Balucani U., Zoppi M.* Dynamics of the Liquid State. Oxford: Clarendon Press, 1994. 178 p.
2. *Iida T., Guthrie R.I.L.* The Physical Properties of Liquid Metals. Oxford: Oxford Sci. Publ., 1988. 288 p.
3. *Götze W.* Complex Dynamics of Glass Forming Liquids. A Mode-coupling Theory. Oxford: Oxford University Press. 2009. 656 p.
4. *Polychroniadou S., Antoniadis K.D., Assael M.J., Bell I.H.* A Reference Correlation for the Viscosity of Krypton from Entropy Scaling // *Int. J. Thermophys.* 2022. V. 43. P. 6.
5. *Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В., Бельтюков А.Л., Олянина Н.В.* Вязкость расплава кобальта: эксперимент, моделирование и теория // *ТВТ.* 2018. Т. 56. № 2. С. 211.
6. *Li N., Wang X.H., Gao N., Chen G.M.* Simple Direct Relationship between Scaled Viscosity and a Dimensionless Calorimetric Parameter for Saturated Liquids // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2022. V. 61. P. 1494.
7. *Blodgett M.E., Egami T., Nussinov Z., Kelton K.F.* Proposal for Universality in the Viscosity of Metallic Liquids // *Sci. Rep.* 2015. V. 5. P. 13837.
8. *Saliou A., Jarry P., Jakse N.* Excess Entropy Scaling Law: A Potential Energy Landscape View // *Phys. Rev. E.* 2021. V. 104. P. 044128.
9. *Karmkar R.C., Gosh R.C.* Validity of the Stokes–Einstein Relation in Liquid 3d Transition Metals for a Wide Range of Temperatures // *J. Mol. Liq.* 2021. V. 328. P. 115434.
10. *Khrapak S.A., Khrapak A.G.* Excess Entropy and Stokes–Einstein Relation in Simple Fluids // *Phys. Rev. E.* 2021. V. 104. P. 044110.
11. *Khrapak S.A.* Diffusion, Viscosity, and Stokes–Einstein Relation in Dense Supercritical Methane // *J. Mol. Liq.* 2022. V. 354. P. 118840.
12. *Nguyen P.T., Khennache S., Galliero G., Tran T., Tuong L., Nguyen P., Hoang H., Ho H.K.* Entropy Scaling for Viscosity of Pure Lennard–Jones Fluids and Their Binary Mixtures // *Comm. Phys.* 2022. V. 32. P. 187.
13. *Dzugutov M.* A Universal Scaling Law for Atomic Diffusion in Condensed Matter // *Nature.* 1996. V. 381. P. 137.
14. *Rosenfeld Y.* A Quasi-universal Scaling Law for Atomic Transport in Simple Fluids // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1999. V. 11. P. 5415.
15. *Bell I.H., Dyre J.C., Ingebrigtsen T.S.* Excess-entropy Scaling in Supercooled Binary Mixtures // *Nature Commun.* 2020. V. 11. P. 4300.
16. *Juhás P., Davis T., Farrow C.L., Billinge S.J.L.* PDFgetX3: a Rapid and Highly Automatable Program for Processing Powder Diffraction Data into Total Scattering Pair Distribution Functions // *J. Appl. Crystallorg.* 2013. V. 46. P. 560.
17. *Швидковский Е.Г.* Некоторые вопросы вязкости расплавленных металлов. М.: Гостехиздат, 1955. 208 с.
18. *Belyukov A.L., Ladyanov V.I.* An Automated Setup for Determining the Kinematic Viscosity of Metal Melts // *Instrum. Exp. Tech.* 2008. V. 51. P. 304.
19. *Khusnutdinoff R.M., Mokshin A.V., Belyukov A.L., Olyanina N.V.* Viscosity and Structure Configuration Properties of Equilibrium and Supercooled Liquid Cobalt // *Phys. Chem. Liq.* 2008. V. 56. P. 561.
20. *Khusnutdinoff R.M.* Dynamics of Liquid Lithium Atoms: Time Scales and Dynamic Correlation Functions // *Acta Phys. Polonica A.* 2020. V. 137. P. 267.
21. *Хуснутдинов Р.М., Мокшин А.В., Бельтюков А.Л., Олянина Н.В.* Вязкость расплава кобальта: эксперимент, моделирование и теория // *ТВТ.* 2018. Т. 56. № 2. С. 211.
22. *Plimpton S.* Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. P. 1.
23. *Sheng H.W., Ma E., Kramer M.J.* Relating Dynamic Properties to Atomic Structure in Metallic Glasses // *JOM.* 2012. V. 64. P. 856.
24. *Bonny G., Pasianot R.C., Malerba L.* Fe–Ni Many-Body Potential for Metallurgical Applications // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2009. V. 17. P. 025010.
25. *Verlet L.* Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard–Jones Molecules // *Phys. Rev.* 1967. V. 159. P. 98.
26. *Chapman S., Cowling T.G.* The Mathematical Theory of Non-uniform Gases. Cambridge: Cambridge University Press, 1970. 448 p.
27. *Maffoli L., Clisby N., Frascoli F., Todd B.D.* Computation of the Equilibrium Three-particle Entropy for Dense Atomic Fluids by Molecular Dynamics Simulation // *J. Chem. Phys.* 2019. V. 151. P. 164102.
28. *Kirkwood J.G., Boggs S.M.* The Radial Distribution Function in Liquids // *J. Chem. Phys.* 1942. V. 10. P. 394.
29. *Hoyt J.J., Asta M., Sadigh B.* Test of the Universal Scaling Law for the Diffusion Coefficient in Liquid Metals // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 594.
30. *Bell I.H., Dyre J.C., Ingebrigtsen T.S.* Excess-entropy Scaling in Supercooled Binary Mixtures // *Nature Commun.* 2020. V. 11. P. 4300.
31. *Khusnutdinoff R.M., Khairullina R.R., Belyukov A.L., Lad'yanov V.I., Mokshin A.V.* Viscous Properties of Nickel-containing Binary Metal Melts // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2021. V. 33. P. 104006.
32. *Li G.X., Liu C.S., Zhu Z.G.* Excess Entropy Scaling for Transport Coefficients: Diffusion and Viscosity in Liquid Metals // *J. Non-Cryst. Solids.* 2005. V. 351. P. 946.
33. *Schenk T., Holland-Moritz D., Simonet V., Bellissent R., Herlach D.M.* Icosahedral Short-Range Order in Deeply Undercooled Metallic Melts // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 89. P. 075507.
34. *Kirova E.M., Norman G.E.* Viscosity Calculations at Molecular Dynamics Simulations // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2015. V. 653. P. 012106.
35. *Meyer A., Stuber S., Holland-Moritz D., Heinen O., Unruh T.* Determination of Self-diffusion Coefficients by Quasielastic Neutron Scattering Measurements of Levitated Ni Droplets // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 77. P. 092201.
36. *Chathoth S.M., Meyer A., Koza M.M., Juranyi F.* Atomic Diffusion in Liquid Ni, NiP, PdNiP, and PdNiCuP Alloys // *Appl. Phys. Lett.* 2004. V. 85. P. 4881.
37. *Iida T., Guthrie R.I.L.* The Thermophysical Properties of Metallic Liquids. V. 2. Predictive Models. Oxford: Oxford Press, 2015. 152 p.
38. *Assael M.J., Kalyva A.E., Antoniadis K.D., Banish R.M., Egrý I., Wu J.T., Kaschnitz E., Wakeham W.A.* Reference Data for the Density and Viscosity of Liquid Antimony, Bismuth, Lead, Nickel and Silver // *High Temp.–High Press.* 2012. V. 41. P. 161.