

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИВТРАН

VII Международная конференция
«КРИСТАЛЛОФИЗИКА И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ
ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ»

ИССЛЕДОВАНИЕ ОЦК- И ГПУ- ФАЗ ЦИРКОНИЯ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Гордеев И.С.
Науч. рук. Стариков С.В.

Фазовые переходы

Методы детектирования

- Однофазное моделирование
- Двухфазное моделирование
- Расчет термодинамических потенциалов через фононные спектры
- Квантовые расчеты

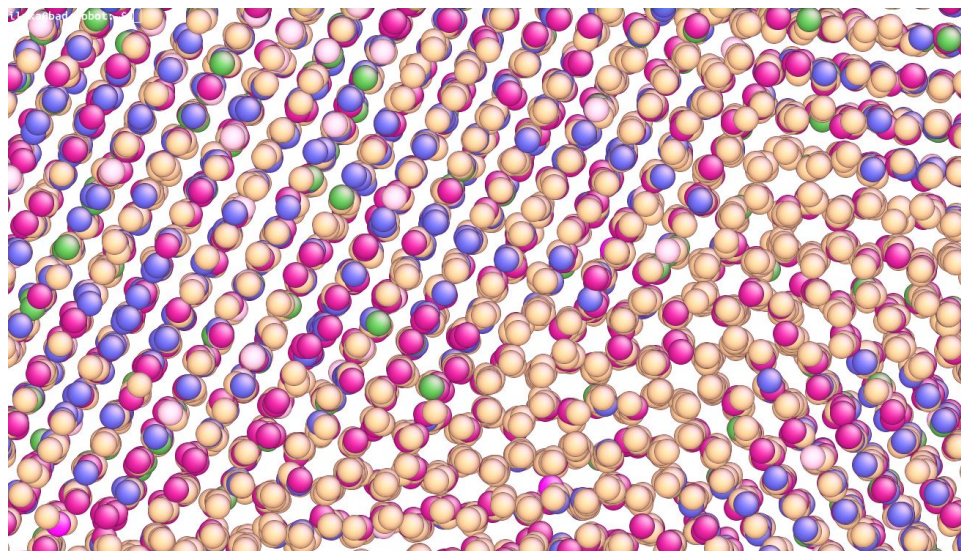
Молекулярная динамика

1. Для описания движения атомов или частиц применяется классическая механика (уравнения Ньютона):

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}$$

2. Наборы конфигураций, получаемые в ходе расчетов методом МД, распределены в соответствии со статистическими функциями распределения;

3. Силы рассчитываются через потенциалы взаимодействия.



Потенциалы

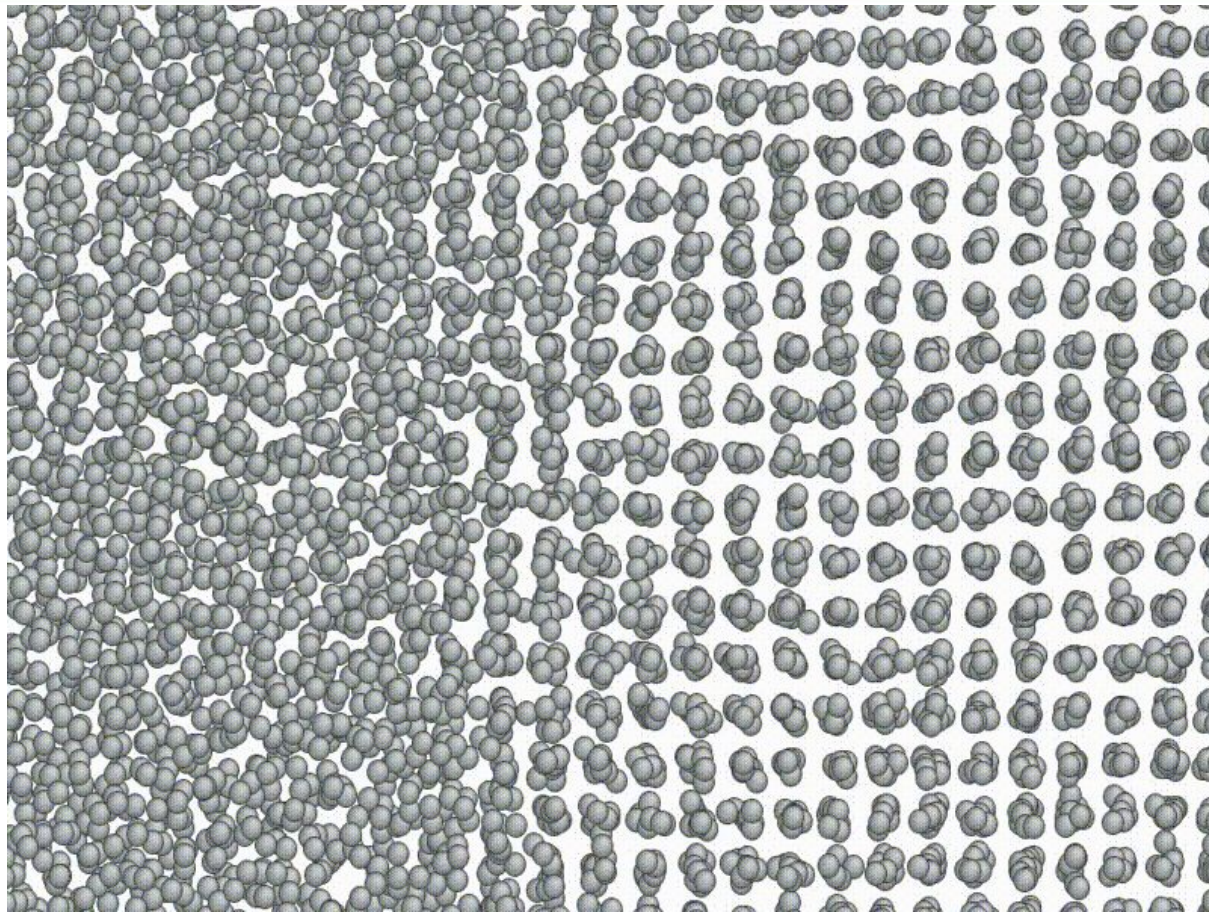
$$E_i = F_a \left(\sum_{i \neq j} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_s (\mu_i^s)^2 + \frac{1}{2} \sum_{st} (\lambda_i^{st})^2 - \frac{1}{6} v_i^2$$

[Smirnova, Starikov // J. All. Comp. (2016)]

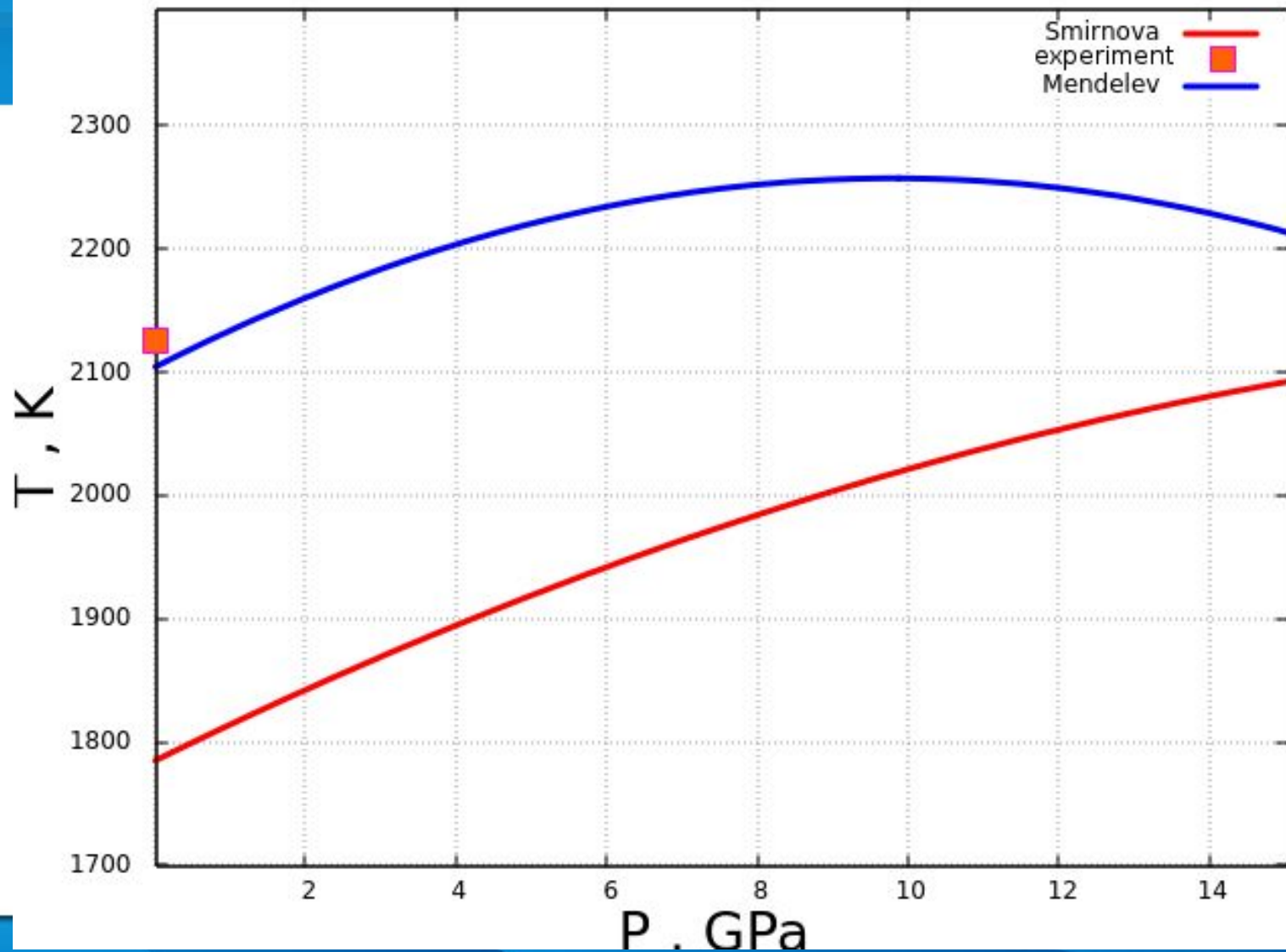
$$E_i = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N V(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F \left(\sum_j \phi(r_{ij}) \right)$$

[Mendelev, Ackland // Phil. Mag. Letters (2007)]

Фазовая граница



Плавление



Проблемы

Свойства потенциалов

Менделев

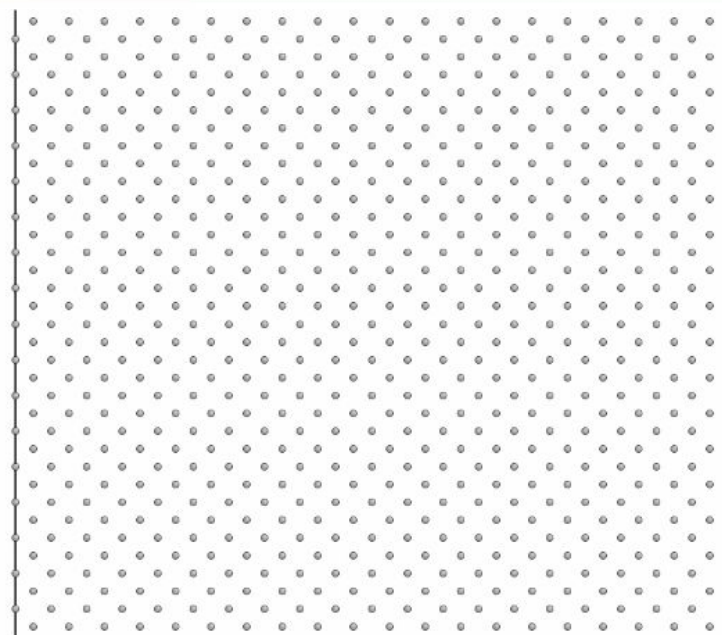
Смирнова

ОЦК-фаза не теряет стабильность при низких температурах

При $T \approx 0$ К и $P = 0$ ГПа

$$H(\text{ОЦК}) = -6,422 \text{ эВ}$$

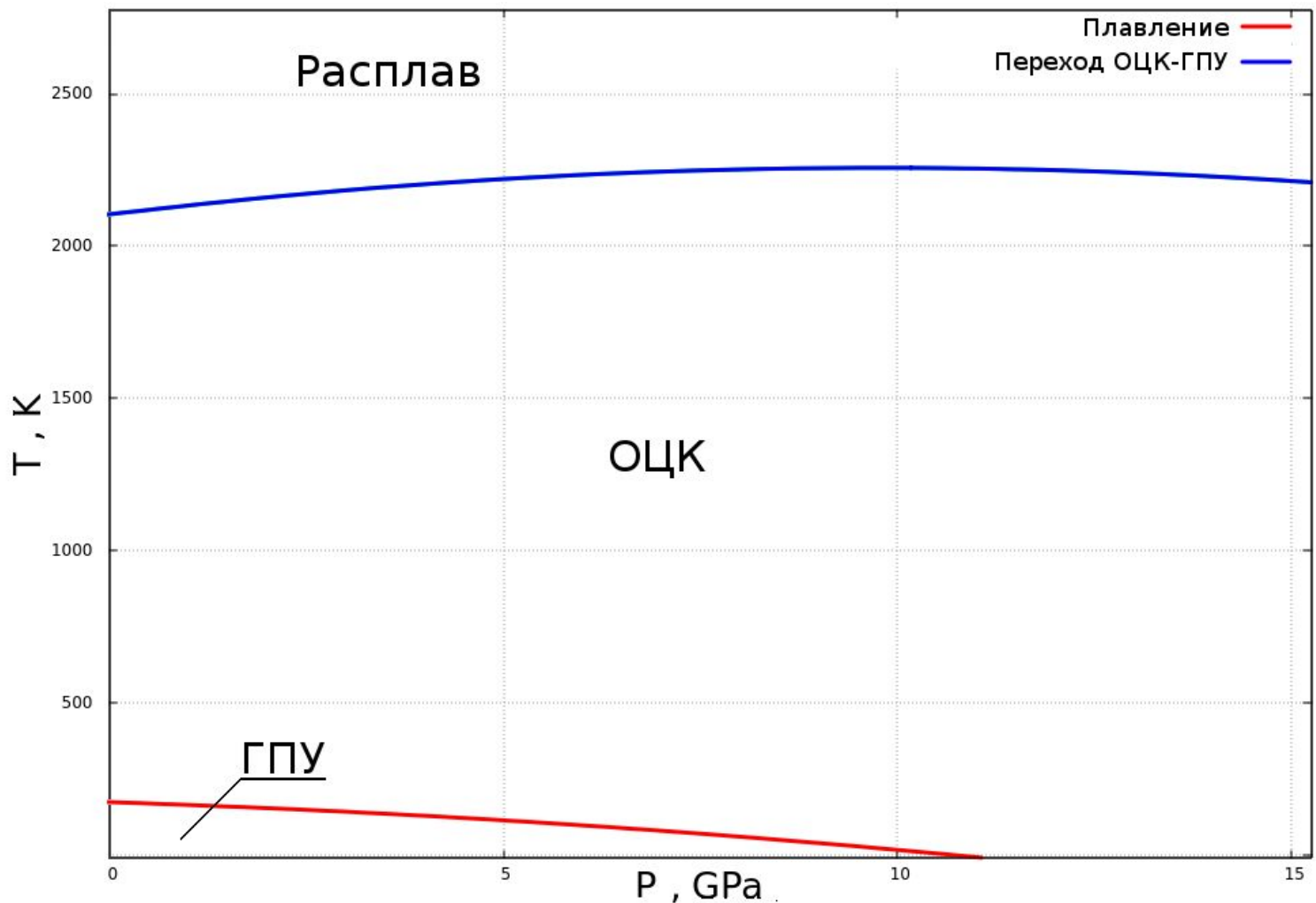
$$H(\text{ГПУ}) = -6,469 \text{ эВ}$$



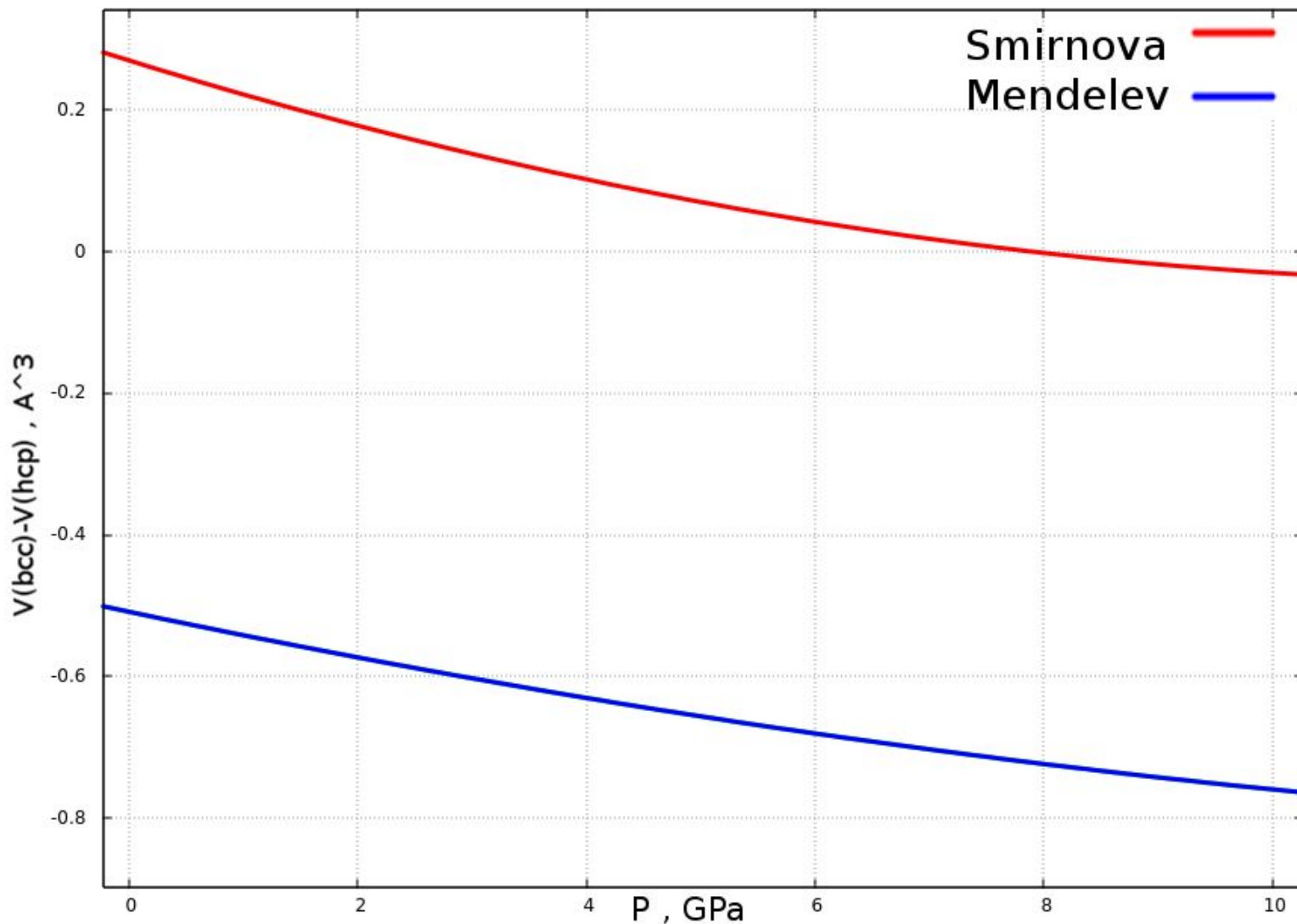
$$H(\text{ОЦК}) = -6,437 \text{ эВ}$$

$$H(\text{ГПУ}) = -6,469 \text{ эВ}$$

Результаты для потенциала Менделеева



Сравнение объемов ОЦК- и ГПУ- фаз



Выводы

- Рассчитаны кривые плавления в широком интервале давлений
- Проведены оценки кривых фазовых переходов ГПУ — ОЦК в кристалле