

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ЦИРКОНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

*Гордеев И. С.*

<sup>1</sup> *ОИВТ РАН, Москва, Россия,* <sup>2</sup> *МФТИ, Долгопрудный, Россия*  
*gordeevilu@gmail.com*

Цирконий является важным конструкционным материалом, однако, его фазовая диаграмма полностью не изучена. Метод молекулярной динамики позволяет рассчитать кривые фазовых переходов различными методами. Целью данной работы является сопоставление результатов таких методов как двухфазное и однофазное моделирования, расчет термодинамических потенциалов через плотность фононных состояний для переходов ОЦК-ГПУ и ОЦК-расплав. Расчеты проводятся для двух потенциалов: EAM-потенциала # 2 [1] и ADP-потенциала [2]. Метод двухфазного моделирования основан на наблюдении за движением границы раздела фаз в двухфазной системе. Метод однофазного моделирования основан на экстраполяции зависимости температуры перехода между фазами при различных скоростях нагревания или охлаждения в однофазной системе. Расчет термодинамических потенциалов с помощью плотности фононных состояний основан на вычислениях скоростной автокорреляционной функции. Все расчеты проводились в LAMMPS.

- 
1. M. I. Mendeleev G. J. Ackland // Philosophical Magazine Letters, Vol. 87, No. 5, May 2007, 349–359.
  2. D.E. Smirnova, S.V. Starikov // Computational Materials Science 129 (2017) 259–272.