

Исследование конгруэнтности плавления системы Ni—Al с использованием нейросетевых потенциалов межатомного взаимодействия

Онегин А.С.¹, Левашов П.Р.^{1,®} и Щелкачев Н.М.¹

¹ Объединенный институт высоких температур Российской академии наук,
Ижорская ул., 13, стр. 2, Москва, 125412, Россия

® pasha@jiht.ru

В работе исследуется плавление упорядоченного B2-NiAl методом молекулярной динамики с использованием нейросетевого потенциала взаимодействия. Температура плавления $T_m(P)$ определяется на основе моделирования сосуществования двухфазного твердого и жидкого вещества в широком диапазоне давлений. По сравнению с имеющимися экспериментальными данными и предыдущими результатами молекулярной динамики, представленные расчеты предсказывают более сильное повышение температуры плавления с увеличением давления. Чтобы оценить термодинамическую согласованность рассчитанной линии плавления, определяются изменения энтальпии и объема при плавлении, а далее наклон кривой плавления из уравнения Клапейрона—Клаузиуса сопоставляется с производной от аппроксимации $T_m(P)$. Эти две оценки хорошо согласуются в большей части исследованного диапазона давлений, что подтверждает согласованность результатов моделирования. Было обнаружено, что сосуществующая жидкость остается, по существу, равноатомной при всех изученных давлениях с отклонениями доли алюминия от стехиометрического значения, не превышающего 5×10^{-3} . Это дает прямое атомистическое доказательство того, что плавление B2-NiAl остается конгруэнтным в рамках настоящей модели.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 25-29-01649.