

РАЗРАБОТКА АТОМИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ПРОГНОЗА СВОЙСТВ БИНАРНОЙ СИСТЕМЫ Zr-Nb

Смирнова Д.Е.,^{1,2} Стариков С.В.,^{*1,2} Гордеев И.С.¹

¹ОИВТ РАН, Москва, Россия, ²ICAMS, Bochum, Германия

*d.e.smirnov@gmail.com

Цирконий входит в состав многих сплавов, которые нашли применение в существенно разных областях: от атомной техники до медицинских материалов. В качестве примеров можно упомянуть коррозионно-стойкие сплавы Zr-2,5% Nb и ряд медицинских сплавов для протезирования на базе Ti-Nb-Zr. Характеристики заданного сплава обуславливаются свойствами фазы циркония, на которой основан сплав. Поэтому определение условий стабильности фаз циркония является важной задачей для дизайна указанных материалов. В то же время, существуют расхождения по вопросам описания фазовых переходов в цирконии. Диапазон вопросов варьируется от неопределенности линии плавления до разногласий в деталях твердофазных фазовых переходов и роли легирующих элементов. В данной работе представлен новый подход к исследованию свойств бинарной системы Zr-Nb. Для решения задачи автора работы сконструировали многочастичный межатомный потенциал [1]. Потенциальные функции были построены по *ab initio* данным, рассчитанным для большого числа эталонных структур. Показано, что разработанная модель с хорошей точностью воспроизводит структуру и свойства всех фаз Nb и Zr, существующих в бинарной системе Zr-Nb. Более того, модель может быть применена для прогнозирования плавления и температур твердофазных переходов α -Zr \leftrightarrow β -Zr. Межатомный потенциал дает возможность для моделирования сплавов Zr-Nb на основе α -Zr и β -Zr. Для иллюстрации этого вывода приведены результаты моделирования сплавов с различным составом: до 7% ниобия в случае сплавов с ГПУ структурой и до 50% ниобия для ОЦК-сплавов. Кроме того, в работе обсуждаются расчеты одноосной деформации, выполненные для атомистических моделей сплавов β -Zr-Nb с различным содержанием ниобия.

-
1. Smirnova D.E., Starikov S.V. // An interatomic potential for simulation of Zr-Nb system. *Comp. Mater. Sci.* 2017 V. 129. P. 259.