

**Исследование методом атомистического моделирования  
фазовой диаграммы циркония**

И. С. Гордеев

Московский физико-технический институт(государственный университет)  
Объединенный институт высоких температур РАН

Цирконий и его сплавы широко используются как конструкционные материалы. Однако фазовая диаграмма циркония до сих пор до конца не была изучена. В данной работе представлены результаты расчетов методом молекулярной динамики фазовой диаграммы циркония в широком интервале давлений и температур. Методом прямого двухфазного моделирования рассчитана кривая плавления вплоть до давления в 16 ГПа. Суть метода заключается в том, что в расчетной ячейке создаются две фазы при фиксированном давлении и температуре : расплав и оцк-фаза. Далее по перемещению фазовой границы делается вывод о стабильности той или иной фазы. Так же в работе представлена рассчитанная область стабильности оцк-фазы. Оценка стабильности оцк-фазы делается на основе ее времени жизни при различных давлениях и температурах. С использованием уравнения Клапейрона-Клаузиуса делается оценка угла наклона кривой равновесия между кристаллическими фазами на РТ — диаграмме. Рассчитан коэффициент теплового расширения для обеих исследуемых фаз.