**Исследование влияния деформации кристаллической решетки ОЦК циркония на диффузионные свойства при высоких температурах с помощью машинно-обученного потенциала межатомного взаимодействия**

***Конов Д.А.***

*Студент*

*Лаборатория моделирования и разработки новых материалов, Национальный исследовательский технологический университет МИСиС, Институт новых материалов и нанотехнологий, Москва, Россия*

*E-mail:* [*konoff1@gmail.com*](mailto:konoff1@gmail.com)

***Научный руководитель*** *– Белов Максим Павлович*

Первопринципные методы на основе квантово-механических вычислений [2] позволяют рассчитывать свойства материалов с высокой точностью. Однако, подобные задачи требуют высоких вычислительных мощностей и поэтому обычно выполняются на вычислительных кластерах. Одним из способов ускорения подобных расчетов является отказ от первопринципных методов учета межатомного взаимодействия в пользу модельных потенциалов, которые позволяют проводить классическую молекулярную динамику при заданных внешних условиях экспоненциально быстрее. Для того, чтобы точность классических расчетов максимально приближалась к квантово-механическим, продолжается разработка различных модельных потенциалов, а также их методов обучения. Одним из таких потенциалов является момент-тензорный тип потенциала, который можно использовать в машинном обучении MLIP [3].

В данной работе с помощью потенциала для чистого циркония, полученного с использованием MLIP были исследованы диффузионные свойства высокотемпературной ОЦК-фазы. Цирконий – металл, широко применяемый в атомной промышленности, кроме того, он близок по свойствам к титану, сплавы которого активно используются в протезировании и конструировании.

Показано, что обученный потенциал воспроизводит экспериментально наблюдаемые свойства циркония, такие как структурное превращение низкотемпературной ГПУ-фазы в высокотемпературную ОЦК-фазу, коэффициент термического расширения ОЦК-фазы [4] и коэффициент диффузии недеформированной ОЦК-фазы [1]. Также было проведено сравнение уравнений состояния ГПУ и ОЦК фаз, полученных методом MLIP и первопринципными методами при нулевой температуре, которое показало хорошее согласие.

При расчете коэффициентов диффузии на температурах 1800-2100 К было установлено, что коэффициент диффузии зависит от деформации, приложенной к кристаллической ячейке. При растяжении ячейки коэффициент диффузии значительно возрастает, а при сжатии уменьшается. Также было показано, что при деформации кристалла на 1% происходит плавление при температурах ниже температуры плавления недеформированного кристалла.

Работа поддержана Российским Научным Фондом, грант № 21-72-10105.

**Литература**

1. Kidson H. and McGurn J. Self-diffusion in body-centered cubic zirconium // Can. J. Phys. 1963. Vol 39. № 8. P. 1146-1157.
2. Kresse G. and Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metal // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 47. № 1. P. 558-561.
3. Novikov I. S. et al. The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Mach. Learn.: Sci. Technol. 2020. Vol. 2. № 2. P. 025002.
4. Petukhov V. Thermal expansion of zirconium in the solid phase // High Temperature – High Pressures. 2003. Vol. 35. № 6. P. 15-23.