**Моделирование фазовых превращений в поликристаллах с помощью момент-тензорных потенциалов межатомного взаимодействия**

***Конов Д.А.***

*Аспирант*

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

*E-mail:* *konoff1@gmail.com*

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

Построение потенциалов для классической молекулярной динамики, способных воспроизводить сложную многоуровневую иерархическую структуру металлов и сплавов, включающую зерна, границы зерен и раздела фаз, различные дефекты и т. д., представляет собой важную задачу в современном материаловедении. Зерна, межзеренные границы, а также фазовый состав могут вносить значительный, а иногда и определяющий вклад в механические и термодинамических свойства материалов. Машинно-обучаемые потенциалы [1], сочетающие в себе точность расчетов в рамках теории функционала электронной плотности [2] и производительность классической молекулярной динамики при моделировании поликристаллических структур, позволяют более эффективно прогнозировать свойства многокомпонентных сплавов с большим, по сравнению с расчётами для монокристаллов, соответствием экспериментальным методам.

В данной работе при помощи момент-тензорного потенциала для чистого циркония, полученного с использованием пакета MLIP [1] была исследована фазовая трансформация в поликристалле циркония при различных температурах. Процесс построения потенциала описан в работе [3]. Для проведения симуляций молекулярной динамики использовалась ячейка кристаллической структуры размером 200х200х200 нм, содержащая 10 зерен со случайной ориентировкой. Фазовый состав во время симуляции определялся с помощью алгоритма PTM (polyhedral template matching) [4], оценивающего топологию локального окружения каждого атома.

Результаты симуляций на низкой температуре показали наличие преимущественно низкотемпературной ГПУ фазы в ячейке, а также присутствие ГЦК фазы, возможность получения которой была теоретически и экспериментально подтверждена как для циркония, так и для титана в работах [5,6] соответственно. С повышением температуры в ячейке предсказывается увеличение содержания дефектной высокотемпературной ОЦК фазы за счет уменьшения содержания всех остальных фаз.

**Литература**

1. 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.
2. Kresse G. and Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metal // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 47. № 1. P. 558-561.
3. Konov D. A., Sidnov K. P.; Sinyakov R. I., Belov M. P. Effect of Deformation on the Diffusion Properties of β-Zr at High Temperatures // Phys. Metals Metallogr. 2024. Vol 125. P.843-850.
4. Peter Mahler Larsen et al. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2016. Vol 24. P.055007.
5. Ji X. Z.,Jona F., and Marcus P. M. Metastable tetragonal states of zirconium: Theory and experiment // Phys. Rev. B. 2003. Vol 68. P. 075421.
6. Wu H. C. Et al. Rolling-induced Face Centered Cubic Titanium in Hexagonal Close Packed Titanium at Room Temperature // Scientific Reports. 2016. Vol 6. P. 24370.