

# Исследование плавления, кристаллизации и структурных фазовых превращений в молекулярно-динамических моделях олова и железа\*

С.П. Проценко<sup>1</sup>, А.О. Типеев<sup>1</sup>, В.Г. Байдаков<sup>1</sup>, Г.В. Ионов<sup>2</sup>, В.В. Дрёмов<sup>2</sup>,  
А.В. Караваев<sup>2</sup>

ФГБУН Институт теплофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия<sup>1</sup>, РФЯЦ – ВНИИТФ  
имени академика Е.И. Забабахина, Снежинск, Россия<sup>2</sup>

Методом молекулярной динамики (МД) с использованием ЕАМ потенциала рассчитаны внутренняя энергия и  $p$ ,  $\rho$ ,  $T$  - свойства жидкого и кристаллического олова в стабильных и метастабильных фазовых состояниях. По данным моделирования методом термодинамического интегрирования определена линия плавления в интервале давлений от 0 до 200 ГПа. При атмосферном давлении полученная в модели температура равновесного плавления  $T_m$  в пределах 12% согласуется с ее экспериментальным значением.

Методом непрерывного нагрева/охлаждения со скоростями 0.1, 0.4, 0.5, 0.8 К/пс при 13 значениях давления из интервале 0 - 300 ГПа в системах из 1024, 2000, 3456, 6750 атомов исследована кинетика спонтанного плавления и кристаллизации. При каждом давлении смоделировано от 20 до 2000 фазовых превращений. Показано, что распределение событий плавления (кристаллизации) близко к распределению Гаусса. По наиболее вероятной температуре фазового перехода  $T_*$ , скорости нагрева, объему метастабильного вещества и полуширине распределения событий плавления по температуре рассчитана частота спонтанного плавления, которая лежит в интервале  $10^{35}$ - $10^{36}$  с<sup>-1</sup>м<sup>-3</sup>. Частота спонтанной кристаллизации составила  $\sim 10^{35}$  с<sup>-1</sup>м<sup>-3</sup>.

Значения  $T_*(p)$ , отвечающие частоте  $\sim 10^{35}$  с<sup>-1</sup>м<sup>-3</sup>, приняты за границы достижимых перегревов кристаллического и переохлаждений жидкого олова. Установлено, что величина перегрева и переохлаждения  $\Delta T = |T_* - T_m|$  возрастает с ростом давления. Так при  $p = 10$  ГПа достижимый перегрев составил 105 К, достижимое переохлаждение 435 К. При  $p = 200$  ГПа кристалл перегревается на 420 К, жидкость переохлаждается на 1280 К. В диапазоне давлений от 10 до 200 ГПа достижимые переохлаждения превышают перегревы в 3-4 раза.

Показано, что в исследованном интервале давлений спонтанное плавлению происходило в одну стадию с характерным временем разупорядочения ОЦК фазы  $\sim 10^{-10}$  с. При кристаллизации переохлажденного жидкого олова при  $p > 20$  ГПа зарегистрированы двух- и трехстадийные скачкообразные изменения плотности и потенциальной энергии.

Для описания ОЦК ( $\alpha$ ) и ГПУ ( $\epsilon$ ) кристаллических фаз железа и полиморфного перехода между ними протестировано пять межатомных потенциалов. При температуре 300К проведены расчеты  $p$ ,  $\rho$ ,  $T$  - свойств ОЦК и ГПУ фаз, на основании которых методом термодинамического интегрирования определены параметры равновесного сосуществования данных кристаллических модификаций. При трех значениях скорости однородной деформации образцов бездефектного ОЦК кристалла из интервала (6.66 - 666.6) мкс<sup>-1</sup> рассчитаны зависимости давления от плотности. Показано, что ЕАМ потенциалы Ackland-Mendelev позволяют получить метастабильные состояния ОЦК фазы при высокой степени сжатия образцов. В модели с потенциалом Ackland, наиболее адекватно воспроизводящем  $\alpha \rightarrow \epsilon$  полиморфное превращение, при давлении равновесия ОЦК и ГПУ фаз, равном 13.8 ГПа,  $\alpha \rightarrow \epsilon$  переход начинался в интервале давлений от 43 до 56 ГПа. Для ЕАМ потенциала Mishin полиморфные превращения регистрировались непосредственно за линией равновесия фаз. Для потенциала MEAM класса ОЦК фаза в образцах, свободных от дефектов, сохраняла устойчивость при давлении до  $\sim 510$  ГПа.

Расчеты проведены с использованием программного комплекса для параллельного молекулярно-динамического моделирования «МОЛОХ».

\* Работа выполнена при поддержке проектов ориентированных фундаментальных исследований УрО РАН 12-2-034-ЯЦ и 13-2-039-ЯЦ.