

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

Томск
Издательский Дом ТГУ
2019

DOI: 10.17223/9785946218412/127

ПОСТРОЕНИЕ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ V-W НА ОСНОВЕ ДАННЫХ CALPHAD ОБ ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ

Максименко В.Н., Липницкий А.Г., Неласов И.В.

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород

Методы компьютерного моделирования на атомном уровне используются для повышения эффективности разработки новых перспективных материалов благодаря получению информации о процессах в материалах на уровне детальности, не доступной в экспериментальных подходах.

В данной работе разработан новый метод построения межатомных потенциалов для моделирования сплавов, который основан на подходе, изложенном в [1]. Для оптимизации параметров потенциальных функций используются экспериментальные и CALPHAD данные. С применением данного метода впервые построены потенциалы для бинарной системы V-W на основе заданных потенциалов V и W.

На рисунке 1 приведены энтальпии образования твердых растворов в сплавах V-W, рассчитанные с помощью разработанного нами потенциала POT_VW, в сравнении с данными CALPHAD [2] при температуре 2000K и нашими расчетами методом ТФП при 0K с использованием известного пакета VASP.

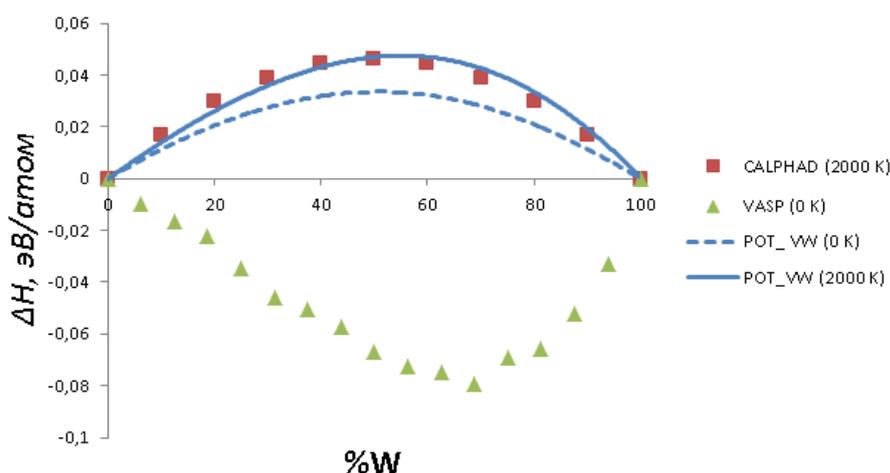


Рис. 1. Энтальпии образования твердых растворов в сплавах V-W

Как видно из рисунка 1 потенциал POT_VW прогнозирует энтальпии образования в сплаве V-W при температуре 2000K в хорошем согласии с данными CALPHAD, основанными на результатах экспериментальных исследований. Результаты наших ТФП расчетов показывают отрицательный знак энтальпии образования во всей области концентраций сплавов V-W в согласии с результатами ТФП расчетов других авторов. Это указывает на проблему ошибок ТФП, связанных с использованием модельного вида плотности обменно-корреляционной энергии для системы V-W. В связи с этим нами разработан новый метод построения межатомных потенциалов в сплавах на основе экспериментальных и CALPHAD данных об энтальпии образования и параметрах решеток без привлечения ТФП расчетов. Построенные потенциалы могут быть использованы для моделирования сплавов системы V-W в широком интервале температур, а разработанный метод позволит строить потенциалы для других сплавов.

Работа была выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-02-00585.

1. Lipnitskii A.G., Saveliev V.N. Development of n-body expansion interatomic potentials and its application for V //Computational Materials Science. 2016. V. 121. P. 67-78.
2. Predel B. VW (Vanadium-Tungsten) //Pu-Re-Zn-Zr. – Springer, Berlin, Heidelberg, 1998. – С. 1-3.