**Атомарный механизм трансформации между ОЦК и ГПУ фазами в цирконии под давлением**

***Синяков Р.И.***

*Аспирант, 2 год обучения*

*Лаборатория моделирования и разработки новых материалов, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Кафедра теоретической физики и квантовых технологий, Москва, Россия*

*E-mail: sinyakov999@mail.ru*

Переход ОЦК–ГПУ является одним из наиболее часто наблюдаемых структурных изменений при мартенситном превращении. Это происходит не только в сплавах с памятью формы, но и в чистых элементах, таких как Zr. Кристаллическая структура чистого нелегированного циркония изменяется при 863 C° от высокотемпературной β-фазы, которая является объемноцентрированной кубической, к низкотемпературной α-фазе, которая представляет собой гексагональную плотноупакованную. Принято считать, что превращение ОЦК-ГПУ происходит по механизму Бюргерса [1] при котором кристалл подвергается одновременной сдвиговой деформации (*ε*) с попеременным перемещением соседних атомных плоскостей (*η*) и описывается ориентационными соотношениями $\left(\overbar{1}10\right)$ОЦК || $\left(0001\right)$ГПУ , $\left[\overbar{1}11\right]$ОЦК || $\left[\overbar{2}110\right]$ГПУ. Один из распространенных способов описаниях механизма Бюргерса это однопараметрические пути трансформации, при которых два параметра перехода - сдвиговая деформация и перемещение атомных плоскостей – заменяются одним [2]. При таком подходе понижается размерность задачи, однако такое описание требует задать атомный механизм трансформации в явном виде. Кроме того, такой подход сохраняет исходный объем на атом ОЦК фазы для всех промежуточных структур на пути трансформации и приводит к идеальному соотношению c/a ГПУ решетки, что редко наблюдается в реальных материалах.

В данной работе предложен метод описания, который учитывает эти проблемы. Данный метод является двухпараметрическим, причем на пути перехода величина объема и параметров решетки линейно скалируются между равновесными значениями для ОЦК и ГПУ фаз. В данной работе в рамках теории функционала электронной плотности проведено исследование атомарного механизма трансформации фаз ОЦК-ГПУ под давлением по модифицированному механизму Бюргерса. Для этого были проведены расчеты релаксации кристаллических структур и определены равновесные параметры ОЦК и ГПУ фаз на низкой температуре при величинах давлений от 0 ГПа до 25 ГПа. Проведены расчеты энергетической поверхности фаз циркония при трансформации ОЦК-ГПУ в координатах (*ε, η*). Используя полученные результаты, в работе был проведен анализ влияния давления на атомный механизм трансформации. Показано, что давление сильно меняет ландшафт энергетической поверхности, что приводит к относительному изменению вкладов сдвига (*ε*) и перемещения атомных плоскостей (*η*) на пути трансформации. Обнаруженное изменение вкладов делает описание трансформации ОЦК-ГПУ структур кристаллов с помощью однопараметрических методов некорректным.

Работа поддержана Российским Научным Фондом, грант № 21-72-10105. Вычисления выполнены на Вычислительном кластере НИТУ «МИСиС».

**Литература**

1. Burgers W. G. On the process of transition of the cubic-body-centered modification into the hexagonal-close-packed modification of zirconium //Physica. – 1934. – Т. 1. – №. 7-12. – С. 561-586.
2. Friák M., Šob M. Ab initio study of the bcc-hcp transformation in iron //Physical Review B. – 2008. – Т. 77. – №. 17. – С. 174117.