

А.А. СУРАЕВА, Ю.А. БОГДАНОВА, И.В. МАКЛАШОВА, А.С. СМАЛЬ

Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

## РАСЧЕТ УПРУГИХ СВОЙСТВ КУБИЧЕСКОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЫ ГИДРИДА АЛЮМИНИЯ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Проведена валидация потенциала межатомного взаимодействия по термодинамическим и структурным данным. Методами молекулярной динамики исследованы упругие свойства  $\beta$ -фазы гидрида алюминия. Представлен анализ влияния давления на упругие модули и параметры решетки.

A.A. SURAEVA, YU.A. BOGDANOVA, I.V. MAKLASHOVA, A.S. SMAL

National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

## CALCULATION OF ELASTIC PROPERTIES OF THE CUBIC METALLIC PHASE OF ALUMINUM HYDRIDE BY MOLECULAR DYNAMICS METHODS

The interatomic interaction potential was validated against thermodynamic and structural data. The elastic properties of the  $\beta$ -phase of aluminum hydride were investigated using molecular dynamics methods. An analysis of the influence of pressure on the elastic moduli and lattice parameters is presented.

Упруго-механические свойства материала, описываемые тензором упругих постоянных, определяют его поведение при механических нагрузках и связанных с ними теплофизические характеристики. Для металлических фаз, представляющих интерес в качестве конструкционных или функциональных материалов, знание упругих модулей и их зависимости от внешних условий является критически важным. Гидрид алюминия, обладающий высокой объёмной плотностью водорода, изучается как перспективный материал для водородной энергетики. Исследование его фундаментальных свойств, включая упругость стабильных или метастабильных фаз, необходимо для оценки технологического потенциала.

В рамках данной работы методом молекулярной динамики рассчитаны упругие свойства  $\beta$ -фазы гидрида алюминия, в частности, зависимость упругих постоянных и модулей от давления.

Были проведены расчёты с использованием различных модификаций модели погруженного атома (EAM) для описания межатомного взаимодействия. Для расчета коэффициентов упругости использовалась взаимосвязь между упругими постоянными, флуктуациями напряжений и матрицей Борна. Серии расчетов выполнены в диапазоне давлений от 1 до 100 ГПа для определения зависимостей упругих модулей и параметров кристаллической решётки от механического воздействия (рисунок 1).

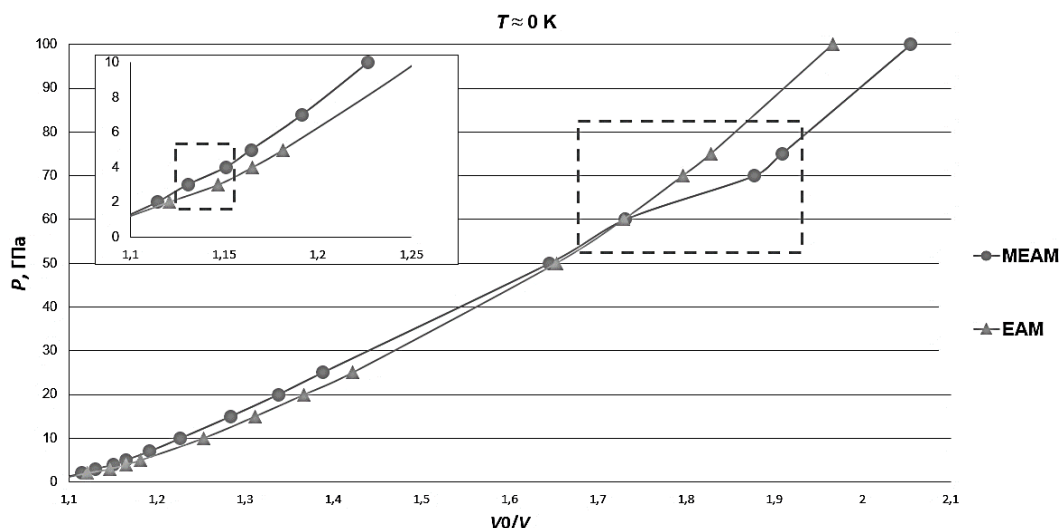


Рис. 1. P-V-диаграмма гидрида алюминия

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 8 «Физика изотопов водорода». Этап 2026-2028

### Список литературы

1. Angelo, J.E.; Moody, N.R.; Baskes, M.I. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 1995, \*3\*, 289.
2. Ko W.-S.; Shim J.-H.; Lee, B.-J. // J. Mater. Res. 2011.