**Построение фазовой диаграммы системы Mg-Ca с учётом статистической погрешности**

***Борток******Д.Е.***

*Студент*

*Московский физико-технический институт, Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной физики, Москва, Россия*

*E-mail: bortok.de@phystech.edu*

Развитие вычислительных мощностей и достижения в области искусственного интеллекта расширили возможности в области численного исследования новых материалов. Построение фазовых диаграмм является важной задачей в индустрии дизайна материалов: численные методы построения диаграмм позволяют оптимизировать поиск материалов с заданными свойствами в ходе эксперимента за счет возможности скрининга большого композиционного пространства. Из данных фазовой диаграммы можно судить о поведении фазы заданного состава в заданном диапазоне температур. В рамках данной работы исследуется система Mg-Ca. Магниевые сплавы примечательны тем, что обладают высокой удельной прочностью, что позволяет использовать их в космической, авиационной и автомобильной промышленности. Кальций образует оксидную плёнку и повышает температуру воспламенения сплава [7], что делает его более устойчивым к возгоранию при плавке, обработке и эксплуатации. Также данные сплавы применяются для создания имплантатов [5]: биосовместимость, биоразлагаемость, высокая прочность и плотность, близкая к плотности кости, способствуют правильному функционированию имплантата и заживлению костей.

В данной работе алгоритм построения фазовой диаграммы в координатах температур-концентраций основан на Байесовском алгоритме обучения [3]. Используя регрессию Гауссовского процесса и данные молекулярной динамики, алгоритм предсказывает свободную энергию, необходимую для построения диаграммы. Значительным преимуществом алгоритма является предсказание ошибки границ раздела фаз, исходя из статистической ошибки в данных. Для выполнения квантово-механических расчётов используется пакет VASP [2], пакет MLIP-2 [4] применяется для обучения MTP потенциалов (Moment Tensor Potential) [6].

Обучение потенциала, набор данных из молекулярной динамики и построение фазовой диаграммы требуют значительно меньших вычислительных мощностей, чем другие методы, основанные исключительно на квантово-механических расчётах. Важное преимущество данного метода заключается в том, что мы не ограничены базами данных (экспериментальными и численными), на которых основаны современные пакеты для построения фазовых диаграмм. Отдельной задачей в данной работе является апробация и усовершенствование автоматической системы расчётов (в т.ч. фазовых диаграмм), разрабатываемой лабораторией.

На сегодняшний день в доступных источниках присутствуют только экспериментальные диаграммы сплава Mg-Ca [1][8]. Методология численного построения фазовых диаграмм на основе системы Mg-Ca позволит рассмотреть системы более сложного состава, что важно в области дизайна новых материалов в медицине и авиастроении.

Выражаю благодарность своему научному коллективу: А.В. Шапееву, Т.Н. Миряшкину, Т.С. Костюченко, Н.Д. Орехову за ценные советы при планировании исследования.

Данная работа выполняется при поддержке гранта РНФ №23-13-00332.

**Литература**

1. Aljarrah M., Medraj M. Thermodynamic modelling of the Mg–Ca, Mg–Sr, Ca–Sr and Mg–Ca–Sr systems using the modified quasichemical model // Calphad. 2008. V. 32 (2). P. 240-251.
2. Kresse G, Hafner. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // J. Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1993.
3. Miryashkin T., Klimanova O., Ladygin V., Shapeev A. Bayesian inference of composition-dependent phase diagrams // Phys. Rev. B. V. 2023. 108(17): 17410.
4. Novikov I. S., et al. The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning // Mach. Learn.: Sci. Technol. 2021. V. 2(2): 025002.
5. Sahu M.R., Kumar T.S.S., Chakkingal U. A review on recent advancements in biodegradable Mg-Ca alloys // J. Magnes. Alloys. 2022. V.10.
6. Shapeev A. V. Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials // Multiscale Model. Simul. 2016. V. 14(3). P.1153-1173.
7. Villegas‑Armenta L. A., Drew R. A. L., Pekguleryuz M. O. The Ignition Behavior of Mg–Ca Binary Alloys: The Role of Heating Rate // Oxid. Met. 2020. V. 93(5-6).
8. Wasiur-Rahman S., Medraj M. Critical assessment and thermodynamic modeling of the binary Mg-Zn, Ca-Zn and ternary Mg-Ca-Zn systems // Intermetallics. 2009. V. 17. P. 847-864.