**Построение фазовой диаграммы двухкомпонентной системы In-Au**

***Ярышева*** ***И.М.***

*Студент*

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

*E-mail: iarysheva.im@phystech.edu*

Задача, решаемая в рамках данной работы, актуальна в области разработки амальгамных УФ-ламп. Существует оптимальный диапазон давлений ртути, при котором выход УФ-излучения максимален [2]. Амальгама в ртутных лампах помогает поддерживать давление ртути в рабочем диапазоне при высоких температурах [2], при этом для корректной работы лампы амальгама должна оставаться твердой на внутренней поверхности лампы во всем диапазоне рабочих температур, тем самым позволяя ртути свободно “выходить” при включении лампы и возвращаться при выключении. Повышение рабочей температуры лампы возможно только при повышении температуры плавления амальгамы, для чего необходимо исследование новых составов последней. Большая часть фазовых диаграмм двухкомпонентных амальгам была рассчитана на основе данных термического анализа [1], однако фазовые диаграммы трехкомпонентных амальгам практически не встречаются в открытых источниках.

В данной работе выполняется построение фазовой диаграммы двухкомпонентной системы In-Au, что в дальнейшем позволит оптимизировать состав золото-индиевой амальгамы. Построение фазовой диаграммы осуществляется на основе молекулярно-динамических расчетов с применением машинно-обучаемого межатомного потенциала MTP (Moment Tensor Potential) [5], реализованном в пакете MLIP-2 [4]. В данной работе МТР предварительно обучается на расчетах из первых принципов на основе теории функционала плотности (ТФП), а затем проводится активное обучение в ходе молекулярной динамики. Для построения фазовой диаграммы используется байесовский алгоритм, позволяющий восстановить свободные энергии с учетом статистической погрешности данных молекулярной динамики [3].

Полученная фазовая диаграмма поможет перейти к рассмотрению трехкомпонентной системы In-Au-Hg и определить оптимальный состав золото-индиевой амальгамы для более эффективной работы УФ-ламп. Разрабатываемая методология позволит рассмотреть большое композиционное пространство и изучить амальгамы разного состава.

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

**Литература**

1. Козловский М.Т., Зебрева А.И., Гладышев В.П. Амальгамы и их применение. Алма-Ата: Наука КазССР, 1971.
2. Lankhorst M.H.R., Niemann U. Amalgams for fluorescent lamps: Part I: Thermodynamic design rules and limitations // J. Alloys Compd. 2000. V. 308 (1-2). P. 280-290.
3. Miryashkin T., Klimanova O., Ladygin V., Shapeev A. Bayesian inference of composition-dependent phase diagrams // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 2023. V. 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. Shapeev A. V. Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials // Multiscale Model. Simul. 2016. V. 14 (3). P.1153-1173.