**Скрининг пластичности металлических сплавов с помощью атомистического моделирования с применением машинно-обучаемых потенциалов**

***Колмаков А.А.***

*Студент*

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

*E-mail:* *kolmakov.aa@phystech.edu*

Важным свойством сплавов металлов является пластичность – способность твердых тел под действием внешних сил изменять свою форму и размеры без разрушения. Для численного моделирования свойств сплавов применяют методы, основанные на полуэмпирических межатомных потенциалах, не являющихся точными, но позволяющих описывать системы вплоть до микрометрового масштаба. Кроме того, используются *ab initio* методы на основе теории функционала плотности (ТФП) [3]. Расчеты в рамках ТФП являются точными, но ресурсоемкими, поэтому применяются для систем с малым числом атомов, а для предсказания таких макропараметров, как пластичность, необходимо исследовать структуры как можно большего размера.

С другой стороны, для моделирования механических свойств, в том числе пластичности, многокомпонентных сплавов, можно применить машинно-обучаемые межатомные потенциалы, точность которых сравнима с ТФП.

Целью данной работы является расчет индекса пластичности как конкуренции между появлением дислокаций и распространением трещины на основе модели линейных деформаций [1, 4], применимой для сплавов с объемноцентрированной кубической решеткой. Для этого необходимо рассчитать поверхностную энергию, энергию дефекта упаковки и константы упругости. При проведении расчета индекса пластичности применяется машинно-обучаемый полиномиальный потенциал MTP (Moment Tensor Potential) [6], реализованный в пакете MLIP-2 (Machine Learning Interatomic Potentials) [5], совместно с ТПФ-расчетами. В качестве системы для отработки методики использованы сплавы тантала, ниобия и молибдена. Механические свойства данных сплавов хорошо изучены как экспериментально, так и теоретически [7], что позволяет верифицировать результаты расчета индексов пластичности, полученных с MTP. Кроме того, данные сплавы являются биосовместимыми (используются для протезирования) [2], поэтому развитие методов, нацеленных на их моделирование, имеет прикладное значение.

С помощью описанного алгоритма была рассчитана зависимость индекса пластичности от состава для системы Ta-Nb-Mo. Данная процедура является длительной и многоэтапной, поэтому резонно автоматизировать алгоритм построения потенциала межатомного взаимодействия на базе MTP и последующего предсказания зависимости индекса пластичности от состава для любого сплава, используя как входные данные только информацию о типе структуры и заданном составе.

**Литература**

1. *Andric P., Curtin W. A.* Atomistic modelling of fracture // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2019. V. 27(1): 013001.
2. *Banerjee R.* [et al]. Strengthening mechanisms in Ti-Nb-Zr-Ta and Ti-Mo-Zr-Fe orthopaedic alloys // Biomaterials. 2004. V. 25(17): 3413-9.
3. *Giustino F.* Materials Modelling using Density Functional Theory. — New York: Oxford University Press, 2014.
4. *Novikov I. S.* [et al.]. AI-accelerated Materials Informatics Method for the Discovery of Ductile Alloys // J. Mater. Res. 2022. V. 37. P. 3491-3504. DOI: [10.1557/s43578-022-00783-z](https://doi.org/10.1557/s43578-022-00783-z).
5. *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.
6. *Shapeev A. V.* Moment tensor potentials: A class of systematically improvable interatomic potentials // Multiscale Model. Simul. 2016. V. 14(3). P. 1153-1173. DOI: [10.1137/15M1054183](https://doi.org/10.1137/15M1054183).
7. *Xinran Z.* [et al]. Self-interstitial atom properties in Nb–Mo–Ta–W alloys // Comput. Mater. Sci. 2024. V. 234: 112765.