

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН
КАЗАНСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. А. Н. ТУПОЛЕВА — КАИ
КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН ПО ФИЗИКЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ
КАЗАНСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ ИМЕНИ Е. К. ЗАВОЙСКОГО
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КАЗАНСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РАН»
АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ ТАТАРСТАН

V МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ГАЗОРАЗРЯДНАЯ ПЛАЗМА И СИНТЕЗ НАНОСТРУКТУР»

Сборник трудов (г. Казань, 20–24 ноября 2024)

Казань
Издательство «Бук»
2025

УДК 533.9+620.3(063)
ББК 22.333+22.353.2я431
П99

Редакционная коллегия:

Борис Ахунович Тимеркаев, член-корр. Академии наук РТ, профессор,
доктор физико-математических наук;
Ильназ Изаилович Файрушин, кандидат технических наук;
Артем Олегович Софроницкий, кандидат технических наук;
Алмаз Ильгизович Сайфутдинов, доктор физико-математических наук.

V Международная конференция «Газоразрядная плазма и синтез наноструктур» : сборник трудов (г. Казань, 20–24 ноября 2024) / М-во высшего образования и науки Российской Федерации, М-во образования и науки Республики Татарстан, Казанский нац. исследовательский технический ун-т им. А. Н. Туполева — КАИ и др. — Казань : Бук, 2025. — 424 с. — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-00254-179-9.

Материалы конференции предназначены для специалистов в области физики газоразрядной плазмы, наноматериалов и нанотехнологий. Могут быть полезны студентам и аспирантам соответствующих специальностей.

УДК 533.9+620.3(063)
ББК 22.333+22.353.2я431

ISBN 978-5-00254-179-9

МАШИННО ОБУЧАЕМЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ РАСПЛАВА ЖЕЛЕЗО-НИКЕЛЬ

А. А. Цыганков^{1,2}, Б. Н. Галимзянов^{1,2}, А. В. Мокшин^{1,2}

¹КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, КАЗАНЬ, РОССИЯ

²ФГБУН "УДМУРТСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР УРАЛЬСКОГО
ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК", ИЖЕВСК, РОССИЯ

Машинное обучение является одним из мощных инструментов при решении физических задач различного характера: описание поведения молекул при известных условиях, исследование переходных процессов в сложных белковых системах, также характеристика структуры вещества, его механических, транспортных, биологических и других свойств [1]. Использование машинно обучаемых межатомных потенциалов – одно из направлений, позволяющее прогнозировать свойства материалов с ab-initio точностью без задания силовых полей в явном аналитическом виде.

В нашем случае производилось исследование расплава Fe₃₀Ni₇₀ при температурах 1773 К, 1823 К, 1873 К, 1923 К для расчета вязкости. Для подготовки начального набора данных для обучения использовался пакет VASP с ультрамягким обменно-корреляционным функционалом [2, 3]. Моделирование производилось в прямоугольной ячейке со 128 атомами и шагом интегрирования 1 фс при температуре 1773 К. Набор данных содержал 12000 конфигураций, из которых 2000 было выделено для тестирования потенциала. Обучение потенциала производилось в пакете DeePMD [4].

После получения потенциала производилось моделирование молекулярной динамики в пакете LAMMPS [5]. При моделировании использовалась прямоугольная ячейка в NVT ансамбле с 3456 атомами и шагом интегрирования 3 фс, размер которой подбирался таким образом, чтобы плотность расплава Fe₃₀Ni₇₀ соответствовала экспериментальной. Результаты расчетов показаны на Рис. 1. Расчет вязкости был выполнен с использованием формулы Кубо-Грина [1]:

$$\eta = \frac{V}{3k_b T^2} \int_0^{\infty} \langle J(0) \cdot J(t) \rangle dt,$$

где V – объем системы, k_b – постоянная Больцмана, T – температура системы, J – поток теплоты, t – время.

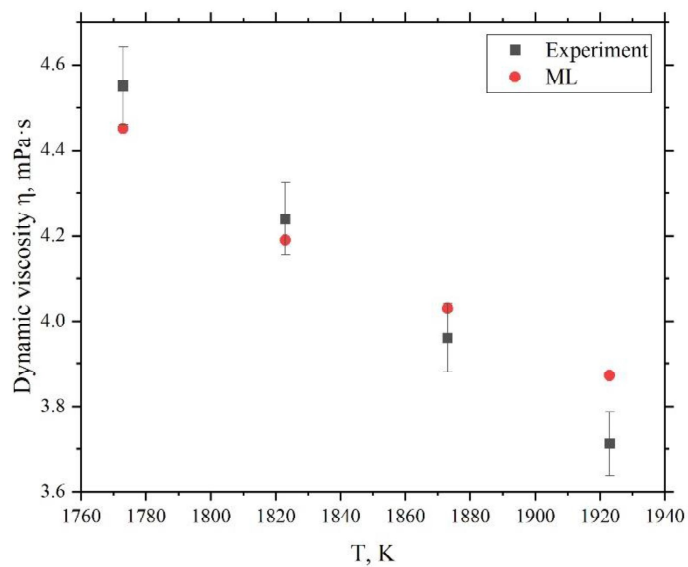


Рисунок 1. Зависимость вязкости от температуры.

В данной работе было показано, что возможно создать машинно обучаемый потенциал для бинарного металлического расплава $\text{Fe}_{30}\text{Ni}_{70}$ без особой потери в точности расчетов вязкости.

Литература:

- [1] R. E. Ryltsev, N. M. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq. 349, 118181 (2022).
- [2] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B. 47, 558 (1993).
- [3] G. Kresse, J. Hafner, J. Phys.: Condens. Matt. 6, 8245 (1994).
- [4] H. Wang, L. Zhang, J. Han, W. E, Comp. Phys. Comm. 228, 178 (2018).
- [5] S. Plimpton, J. Comp. Phys. 117, 1 (1995).

tsigankov.artiom@yandex.ru