

10. Novikov I. S. [et al.] The MLIP package: moment tensor potentials with MPI and active learning //Machine Learning: Science and Technology. – 2020. – Т. 2. – №. 2. – С. 025002.
11. Novoselov I. I. [et al.] Moment tensor potentials as a promising tool to study diffusion processes //Computational Materials Science. 2019. V. 164. P. 46-56.
12. Novikov I. S., Suleimanov Y. V., Shapeev A. V. Automated calculation of thermal rate coefficients using ring polymer molecular dynamics and machine-learning interatomic potentials with active learning // Physical Chemistry Chemical Physics. 2018. V. 20, N 46. P. 29503-29512.
13. Novikov I. S., Shapeev A. V., Suleimanov Y. V. Ring polymer molecular dynamics and active learning of moment tensor potential for gas-phase barrierless reactions: Application to S + H2 //The Journal of chemical physics. 2019. V. 151, P 22. P. 224105.

УДК 538.911

Универсальность потенциалов межчастичного взаимодействия для жидких щелочных металлов

А.А. Цыганков, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Получен потенциал взаимодействия, позволяющий описывать статические и динамические свойства щелочных металлов в жидком состоянии вблизи точки плавления. Моделирование атомистической динамики проводилось в среде LAMMPS [1] с модельным потенциалом, имеющим следующий вид:

$$U(r) = A \exp(-\eta(r - r_0)) + \frac{B}{r^n} \cos(\omega r + \phi), \quad (3)$$

здесь $A, \eta, r_0, B, n, \omega, \phi$ – параметры потенциала взаимодействия. Здесь первый член характеризует короткодействующее отталкивание, второй – осцилляции Фриделя. Значения коэффициентов потенциала взаимодействия были подобраны из результатов машинного обучения в пакете Atomicrex [2], алгоритм – контролируемый случайный поиск с локальной мутацией [3]. Начальные условия моделирования: начальное состояние в виде кристалла с ОЦК решёткой, всего 9826 частиц, постоянные решётки взяты таким образом, чтобы соответствовать количественной плотности систем на эксперименте и равны 3.557, 4.282, 5.332, 5.772, 6.215 ангстрем для лития, натрия, калия, рубидия, цезия соответственно [4]. Временной шаг интегрирования равен 10 фс. Данная модель позволяет воспроизводить на эксперименте радиальную функцию распределения [5]:

$$g(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N} \left\langle \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\Delta n_i(r)}{\Delta r} \right\rangle, \quad (4)$$

также статический структурный фактор, связанный с радиальной функцией распределения, следующим соотношением [5]:

$$S(k) = 1 + 4\pi\rho_n \int_0^{\infty} r(g(r) - 1) \frac{\sin(kr)}{k} dr, \quad (5)$$

здесь V – объём системы, N – число частиц в системе, $\Delta n_i(r)$ – число частиц в слое толщиной Δr , $\rho_n = N/V$ – концентрация частиц в системе. На рис. 1 приведены результаты расчета радиальной функции распределения и экспериментальные данные. На рис. 2 приведены результаты расчёта статического структурного фактора и экспериментальные данные.

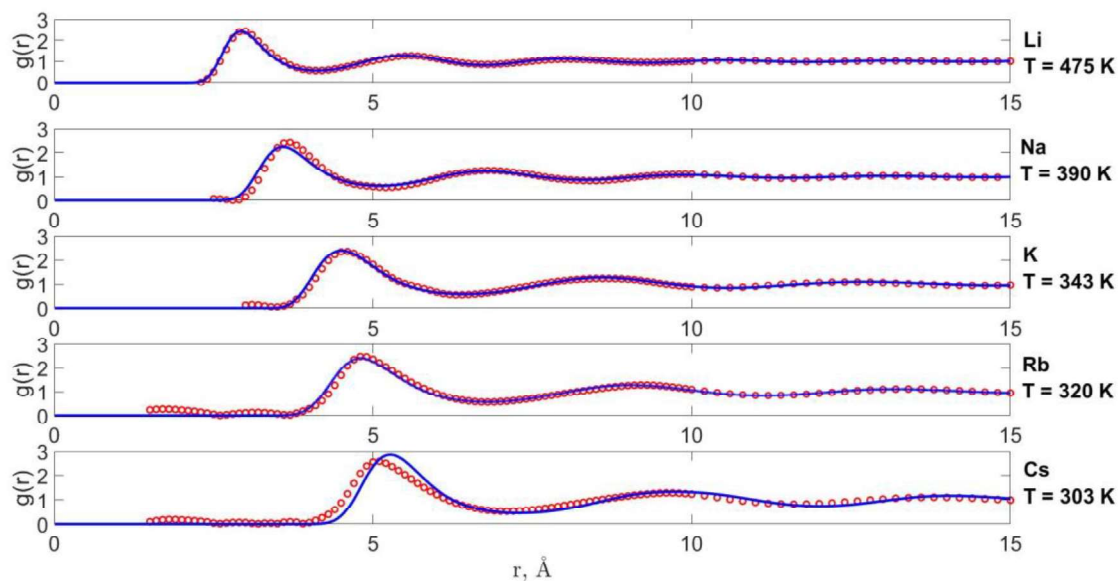


Рис. 1. Радиальная функция распределения (сверху вниз) для: лития ($T = 475$ К), натрия ($T = 390$ К), калия ($T = 343$ К), рубидия ($T = 320$ К), цезия ($T = 303$ К). Линией обозначены результаты моделирования, точками – экспериментальные данные [4]

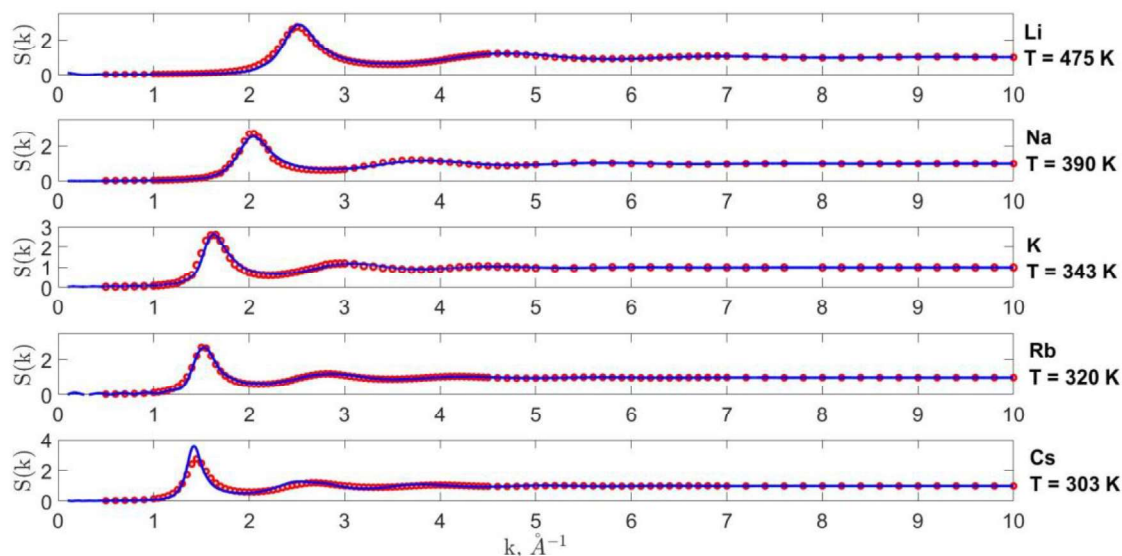


Рис. 2. Статический структурный фактор (сверху вниз) для: лития ($T = 475$ К), натрия ($T = 390$ К), калия ($T = 343$ К), рубидия ($T = 320$ К), цезия ($T = 303$ К). Линией обозначены результаты моделирования, точками – экспериментальные данные [4]

Литература

1. *Plimpton S.* Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. V. 117. P. 1-19.
2. *Stukowski A., Fransson E., Mock M., Erhart P.* Atomicrex – a general purpose tool for the construction of atomic interaction models // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2017. V. 25. P. 055003.
3. *Kaelo P., Ali M.M.* Some variants of the controlled random search for global optimization // *J. Optim. Theory Appl.* 2006. V. 130. P. 253-264.
4. *Waseda Y.* The structure of Non-Crystalline materials: Liquids and Amorphous Solids. New York : McGraw-Hill, 1980. P. 326.
5. *Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.* Молекулярная динамика при структурных трансформациях в неупорядоченных системах Казань : Казанский университет, 2017. 159 с.