



## Параметрическая идентификация потенциала RGL для молекулярно-динамического моделирования

Ксемидов Борис Сергеевич  
Аксентьев Артем Алексеевич  
Абгарян Каринэ Карленовна  
Бажанов Дмитрий Игоревич

Актуальность: Использование первопринципных методов для моделирования динамических процессов в различных твердотельных системах крайне затруднено в связи с вычислительной сложностью проводимых расчётов. Поэтому для проведения динамических расчётов с большим количеством атомов используются методы молекулярной динамики, в которых временная эволюция системы взаимодействующих атомов отслеживается интегрированием уравнений движения [1,2]. При моделировании процессов взаимодействия металлов с поверхностью твердых тел возможно использовать молекулярно-динамические подходы, при этом для повышения точности моделирования в качестве потенциала межатомного взаимодействия, в данной работе применялся потенциал RGL [3], хорошо зарекомендовавший себя в расчетах металлических структур. Для того, чтобы под конкретные процессы взаимодействия уточнить параметры потенциала были проведены расчёты структурных характеристик металлов, участвующих в рассматриваемом процессе.

1 С помощью программного комплекса для проведения квантово-механических расчетов Quantum ESPRESSO (QE) [4] вычислялись энергетические характеристики исследуемых металлов. Для этих целей использовались высокопроизводительные ресурсы вычислительного кластера ФИЦ ИУ РАН. После чего рассчитывались необходимые значения когезионной энергии, константы упругости и другое [5].

2 Процесс взаимодействия металла с поверхностью другого металла изучался с применением потенциала RGL.

$$E_R^i = \sum_j \left( A_{\alpha\beta}^1 (r_{ij} - r_0^{\alpha\beta}) + A_{\alpha\beta}^0 \right) \exp \left( -p_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right), \quad E_B^i = - \left( \sum_j \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left( -2q_{\alpha\beta} \left( \frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1 \right) \right) \right)^{1/2}, \quad E^i = E_R^i + E_B^i$$

3 Решалась задача по определению параметров данного потенциала с использованием характеристик материала - для этого был построен целевой функционал, который оптимизировался (для оптимизации функционала использовался метод нулевого порядка – GRS [6], показавший наилучшие результаты в сравнении с методами Нелдера-Мида и Хука-Дживса [5]).

4 Сравнение значений когезионной энергии, полученных в ходе расчётов в QE, и расчётов, полученных с помощью RGL с параметрами, идентифицированными при помощи созданной программной реализации, показало, что результаты получаются с допустимой погрешностью.

$$F = \sqrt{\frac{\sum_i^n (\text{value}_{\text{table}} - \text{value}_{\text{calc}})^2}{n}}$$

Параметр	Идеальное значение	Рассчитанное
$E_{coh}$	-2.960	-2.95741
$B$	1.08	1.07411
$C_{11}$	1.32	1.33109
$C_{12}$	0.97	0.945614
$C_{44}$	0.51	0.516112
$E_{sol}$	0.497	0.496568
$E_{dim}^{in}$	0.22	0.22045
$E_{dim}^{on}$	-0.36	-0.359713

### Литература

1. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики. Часть 2. Введение в методы частиц.-Москва.Ижевск.: Ниц «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований. 2006 г. -156 С.
2. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. – Москва. МАКСПресс -2017. 284 С.
3. Rosato V., Guillope M., Legrand B. Thermodynamical and structural properties of fcc transition metals using a simple tight-binding model //Philosophical Magazine A. – 1989. – Т. 59. – №. 2. – С. 321-336.
4. Giannozzi P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials //Journal of physics: Condensed matter. – 2009. – Т. 21. – №. 39. – С. 395502.
5. Хук Р., Дживс Т.А. . Прямой поиск решения для числовых и статических проблем. -М.: Mir., pp.212—219, 1961
6. Powell D. Elasticity, Lattice Dynamics and Parameterisation Techniques for the Tersoff Potential Applied to Elemental and Type III-V Semiconductors : дис. – University of Sheffield, 2006.