

Машинообучаемый потенциал Li-C для наноматериалов

Созыкин С.А.¹

sozykinsa@susu.ru

¹ ЮУрГУ (НИУ), Челябинск, Россия

Взрывной рост потребности в портативных источниках энергии вызвал активное исследование углеродных наноструктур в качестве материала анода литиевых батарей [1]. Распространенным теоретическим подходом к изучению адсорбции лития на углеродных поверхностях выступает теория функционала электронной плотности. У нее есть неоспоримое преимущество: практически отсутствует необходимость в априорных сведениях об исследуемой системе, а достоверность получаемых результатов ограничена только доступными вычислительными ресурсами. Последнее обстоятельство заметно ограничивает размер модели, доступный для изучения. Альтернативой выступает классическая молекулярная динамика с межчастичными потенциалами взаимодействия, зависящими от нескольких параметров. Параметры эти можно подбирать из разных соображений, но получаемый потенциал оказывается применим только для узкого класса объектов (близких к тем системам, под которые проводилась подгонка параметров).

Качественный скачок в улучшении предсказаний классического моделирования может быть получен с помощью методов искусственного интеллекта, где потенциал строится по данным расчетов методом теории функционала электронной плотности, но не в виде явной функции, а в виде нейронной сети. Это очень бурно развивающееся направление исследований, открывающее возможность проведения моделирования методом классической молекулярной динамики с точностью, не уступающей методу неэмпирической молекулярной динамики. Данное исследование направлено на построение такого потенциала для описания взаимодействия лития с поверхностью углеродных нанотрубок и графеноподобных структур. Такого рода потенциалы уже создавались для углерода [2] и систем литий-углерод [3]. Используемый в настоящем исследовании подход отличается от применявшегося в упомянутой работе [3]. В докладе будут подробно описаны получаемые из-за этого отличия в результатах моделирования.

Нейронная сеть обучалась на комплексах углеродных наноструктур (нанотрубки, бифенилен, ирида-графен, ψ -графен, тетра-пента-дека-гексагональный графен) с литием с использованием программы DP-GEN [4]. Модели содержали около 100 атомов углерода и до 20 атомных процентов лития. В качестве кванто-механической программы использовался пакет VASP [5]. На первом этапе разработки потенциала, который представлен в настоящем исследовании, расчеты в программе VASP проводились без учета спина. Это позволило заметно сократить время одного расчета и получить за несколько месяцев около 5000 структур для обучения нейронной сети.

Ссылки

1. Wu Z., Sun K., Wang Z., Batteries (2022), 8, 246.
2. Rowe P., Deringer V.L., Gasparotto P., Csányi G., Michaelides A., Journal of Chemical Physics (2020), 153, 034702.
3. Fujikake S., Deringer V.L., Lee T.H., Krynski M., Elliott S.R., Csányi G., Journal of Chemical Physics (2018), 148, 241714.
4. Yuzhi Z., Haidi W., Weijie C., Jinzhe Z., Linfeng Z., Han W., Weinan E., Computer Physics Communications (2020), 253, 107206.
5. Kresse G., Furthmuller J., Physical Review B (1996), 54, 11169.