

В вычислительной физике существует очень важная и теоретически сложная задача восстановления поверхности потенциальной энергии (ППЭ) кристалла, которая содержит в себе информацию о его физических свойствах. В самом деле, зная ППЭ твердого тела, можно определить его стабильные и метастабильные фазы, пути фазового перехода, первая производная несет информацию о распределении сил в кристалле, а вторая — о механических свойствах вещества. В настоящее время для точного описания ППЭ используются, например, вычисления основанные на первых принципах — теория функционала плотности (ДФТ). С помощью ДФТ можно получить очень точные результаты, но за большой промежуток времени. С другой стороны, можно использовать эмпирические потенциалы, они работают намного быстрее, но их точность на порядки хуже, чем у вычислений из первых принципов. Мы предлагаем использовать алгоритмы машинного обучения для описания ППЭ, так как они более общие (одним алгоритмом можно описать любые системы), более точные и занимают гораздо меньше времени, чем ДФТ.

В качестве основного алгоритма были выбраны нейронные сети, так как они в более общем смысле описывают различные системы и уже существует опыт их применения в кристаллохимии [1]. Нейронные сети имеют один большой недостаток — невозможно проанализировать тот физический смысл, который они в себе несут после «обучения». В данной работе мы предлагаем схему, которая позволяет визуализировать парный потенциал взаимодействия между атомами, то есть получить более глубокое представление о взаимодействиях в кристалле. Схема заключается в том, что энергия кристалла представляется как сумма двухчастичного и многочастичного вклада. Первая часть суммы описывается линейной регрессией, а вторая — нейронными сетями.

Для того, чтобы использовать алгоритмы машинного обучения в кристаллохимии, необходимо найти способ описания геометрии кристалла, который бы не зависел от трансляций и поворотов системы координат. Мы дополнили уже существующий метод (см. [1]) структурными суммами по кристаллу, которые строятся на подобие сумм Эвальда [2] и позволяют описать двухчастичное взаимодействие.

Нами были изучены системы алюминия, углерода и благородных газов. Точность нашего алгоритма составляет 0.05 еВ/атом и он позволяет предсказывать энергии новых

структур в большом интервале. Используя метод структурных сумм, были восстановлены и проанализированы потенциалы взаимодействия в изучаемых системах. С их помощью можно изучать осцилляции Фриделя в металлах, сумму ковалентных или ионных радиусов в самых стабильных структурах и многое другое (рис. 1).

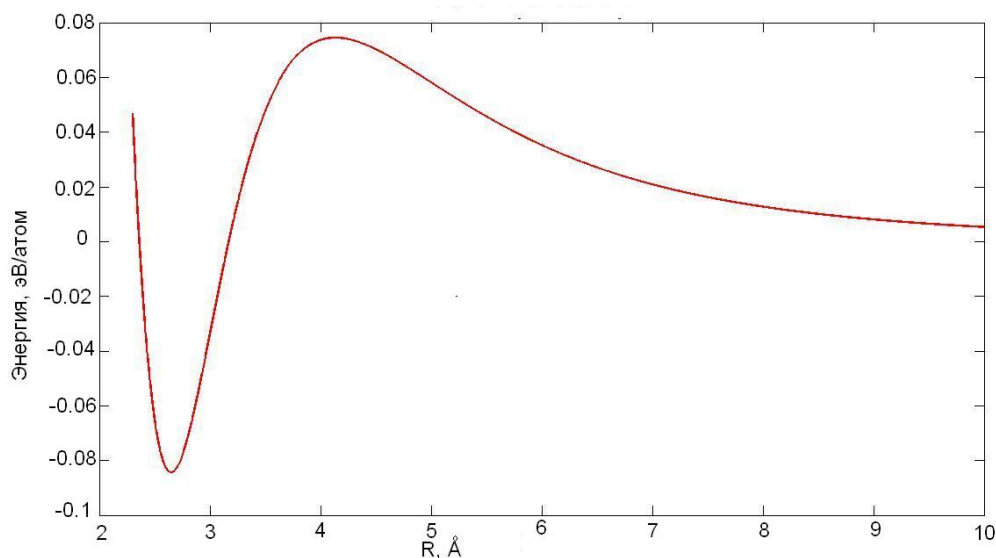


Рис. 1. Парный потенциал взаимодействия в структурах алюминия

Литература

1. Behler, J. Neural network potential-energy surfaces in chemistry: a tool for large-scale simulations // *Physical Chemistry Chemical Physics* – 2011. – V. 13, N 40. – P. 17930-17955.
2. Ewald, P. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale // *Annalen der Physik* – 1921. – V. 369, N 3. – P. 253-287.