

0.1. Костюченко Т.С., Богданов Н.М., Шапеев А.В., Новиков И.С. Разработка машинно-обучаемого потенциала на решетке с магнитными степенями свободы

Численное моделирование в задаче дизайна материалов стало неотъемлемой частью современного исследования новых материалов. В частности, особый интерес представляют многокомпонентные сплавы, как перспективные конструкционные материалы. Однако большое конфигурационное пространство задачи может требовать значительных затрат ресурсов. Одной из целей развития вычислительно эффективных методов численного исследования материалов является возможность оптимального планирования экспериментов.

В данной работе представлена методология, разработанная на основе канонического метода Монте-Карло с применением малорангового машинно обучаемого потенциала «на решетке». Потенциал строится на основе расчетов из первых принципов. Методология успешно применялась для исследования химического ближнего порядка и устойчивости в эквивалентных сплавах NbMoTaW, VCoNi и AlNbTiV. Причем при исследовании VCoNi расчеты из первых принципов производились с неявным учетом магнитных спинов атомов, что оказалось критичным для температуры фазового перехода порядок-беспорядок. Так было принято решение о разработке потенциала с явным учетом магнитных моментов с целью повышения точности потенциала, а также для реализации возможности исследования магнитного порядка материалов.

Современные модели, предлагающие явный учет магнитных взаимодействий параметризуются на расчетах из первых принципов с коллинеарными спинами (неколлинеарные требуют значительно больших вычислительных ресурсов). Эти модели предлагают аппроксимацию при отклонении от коллинеарного направления. Так было принято решение построить модель малорангового потенциала с коллинеарными спинами и апробировать ее на примере систем объемно-центрированных кристаллических решеток Fe и FeCo. Учет магнитных моментов значительно повысил точность модели малорангового потенциала, однако, коллинеарная модель некорректно воспроизводит температуры магнетизации. Вследствие полученных результатов было принято решение о разработке потенциала с возможностью учета неколлинеарных спинов. Успешное построение малорангового машинно обучаемого потенциала с возможностью учета неколлинеарных магнитных моментов позволит изучать параметры магнитного порядка материалов с высокой точностью и вычислительной эффективностью.

Работа выполнена при поддержке РФФ (грант № 22-73-10206).