

### 0.1. Сотсков В.Е. Предсказание новых материалов с заданной кристаллической решёткой

Важным условием для развития технологических отраслей является наличие новых материалов. В связи с этим, в последние десятилетия стала активно развиваться такая область, как компьютерный дизайн материалов. Она включает в себя вычислительные методы, основанные на квантово-механических моделях межатомного взаимодействия. Такие методы позволяют предсказывать кристаллическую структуру новых материалов с высокой точностью и при этом не нуждаются в каких-либо эмпирических параметрах.

Однако, для предсказания кристаллической структуры необходимо перебрать все возможные пространственные расположения атомов на энергетическом ландшафте, что является невыполнимой задачей. На данный момент, с определённым успехом с ней справляются различные эволюционные алгоритмы [1]. Тем не менее, они не обладают достаточной эффективностью для предсказания многокомпонентных систем. Очевидно, разработка нового алгоритма, позволяющего эффективно предсказывать многокомпонентные структуры, является необходимой.

Для решения данной задачи был разработан алгоритм по предсказанию структур на фиксированной кристаллической решётке. Использование данного подхода существенно снижает вычислительную сложность задачи и, фактически, сводит её к поиску структур с наиболее стабильной стехиометрией при заданной решётке. Разработанный алгоритм основан на поэтапном построении кристаллической структуры с отбором наиболее низкоэнергетического варианта на каждом этапе. Кристаллическая структура представляется в виде совокупности групп атомов, именуемыми кластерами. Для расчёта энергии структуры была использована модель кластерного разложения [2]:

$$E(\sigma) = \sum_i J_i \sigma_i + \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_{ijk} J_{ijk} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + \dots,$$

где  $J$  - так называемый коэффициент взаимодействия кластера,  $\sigma_i$  - тип атома  $i$ , а  $\sum_i J_i \sigma_i$ ,  $\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$ ,  $\sum_{ijk} J_{ijk} \sigma_i \sigma_j \sigma_k$  - энергетические вклады кластеров из одного, двух и трёх атомов соответственно. Для обучения данной модели была использована обучающая выборка из пар структура-энергия, рассчитанных с помощью теории функционала плотности с использованием программного пакета VASP [3]. В общей сложности понадобилось около 300 структур размером от 4 до 16 атомов для достижения приемлемой среднеквадратической ошибки обучения в 3 мЭв/атом. На данном этапе эффективность алгоритма была продемонстрирована

на бинарных соединениях. Так, им были найдены все известные стабильные соединения сплава Nb-W с ОЦК решёткой, в частности, со структурами В2 и В32. Помимо этого, были обнаружены новые сплавы Nb<sub>2</sub>W<sub>3</sub> и Nb<sub>2</sub>W<sub>5</sub>. Также были получены все известные стабильные соединения сплава Ni-Pt с ОЦК решёткой. Полученные результаты демонстрируют способность алгоритма к поиску структур с большей эффективностью чем известные на данный момент методы, что подтверждает его теоретическую и прикладную значимость.

*Научный руководитель — к.ф.-м.н. Шапеев А.В.*

#### Список литературы

- [1] GLASS C.W., OGANOV A.R. Crystal structure prediction with evolutionary algorithms // IUCr Commission on Powder Diffraction Newsletter. 2007. Vol. 35. P. 9–12.
- [2] WU Q., HE B., SONG T., GAO J., SHI S. Cluster expansion method and its application in computational materials science // Computational Materials Science. 2016. Vol. 125. P. 243–254.
- [3] KRESSE G., FURTHMULLER J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set science // Physical Review B. 1996. Vol. 54. P. 11169–11186.