

Атомистическое моделирование границ зерен в хромите магния на основе машинного обучения

Научный руководитель – Волкова Елена Александровна

Котелевская Екатерина Юрьевна

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: katerina.kotelevska@mail.ru

В современных материаловедческих исследованиях границы зерен (ГЗ) в поликристаллических материалах играют ключевую роль в определении свойств. Шпинелиды, такие как хромит магния ($MgCr_2O_4$), перспективны для широкого спектра применений, включая высокотемпературную электронику и катализ, но межзёрненные границы изучены недостаточно.

Предлагается комплексный подход к моделированию ГЗ в шпинелидах, объединяющий квантовохимические расчеты (DFT), машинное обучение (МТР) и метод разбавления для создания структур ГЗ с разными ориентациями. Для верификации используется медь как модельная система. Метод разбавления позволяет строить модели сингулярных и ступенчатых границ.

Для обучения МТР потенциала разработан специальный потенциал для меди. Модели ГЗ в меди подвергнуты DFT расчетам для определения локальной энергии и сил. На основе этих расчетов создан межатомный потенциал методом машинного обучения, использованный для построения сложных моделей ГЗ. Полученный МТР потенциал оптимизирован для описания границ зерен в меди, и адекватность подхода проверяется сравнением с экспериментальными данными. Это позволяет убедиться в надежности метода до применения к более сложным шпинелидам.

Атомистическое описание ГЗ с МТР позволяет исследовать сложные явления и предсказывать свойства ГЗ в зависимости от ориентации, состава и типа границ, а также выявить связь со свойствами материала. Особое внимание уделяется плотности расположения атомов вблизи границы и её соотношению с энергией. Рассмотрение проводится с аналитической точки зрения, учитывая геометрические и термодинамические модели, для интерпретации результатов и установления связи между структурой границ и их свойствами.

Исследование нацелено на развитие новых методов компьютерного моделирования границ зерен для создания новых материалов с контролируруемыми свойствами и более глубокого изучения физики и химии межзёрненных границ, включая их влияние на макроскопические свойства материалов.

Источники и литература

- 1 Podryabinkin E. et al. MLIP-3: Active learning on atomic environments with moment tensor potentials //The Journal of Chemical Physics. – 2023. – Т. 159. – №. 8.
- 2 Ashby M. F., Spaepen F., Williams S. The structure of grain boundaries described as a packing of polyhedra //Acta Metallurgica. – 1978. – Т. 26. – №. 11. – С. 1647-1663.
- 3 Wolf D. Structure-energy correlation for grain boundaries in fcc metals—IV. Asymmetrical twist (general) boundaries //Acta metallurgica et materialia. – 1990. – Т. 38. – №. 5. – С. 791-798.

- 4 Bulatov V. V., Reed B. W., Kumar M. Grain boundary energy function for fcc metals
//Acta Materialia. – 2014. – Т. 65. – С. 161-175.