

2. Д. А. Корель, О. Л. Ташлыков, В. А. Мунц, Энерго- и ресурсосбережение. Энергообеспечение. Нетрадиционные и возобновляемые источники энергии. Атомная энергетика: материалы Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых – Даниловских чтений, 737-740 (2019).

3. И. И. Свириденко, А. Ю. Москаленко, Проблемы промышленной теплотехники: Тезисы IV Межд. конф. – Киев, ИТТФ НАН Украины, 255–256 (2005).

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Балякин И.А.<sup>1,2</sup>, Ремпель А.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Институт Metallургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> НОЦ NANOTECH, Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия

E-mail: [i.a.balyakin@gmail.com](mailto:i.a.balyakin@gmail.com)

## MOLECULAR DYNAMICS OF HIGH ENTROPY ALLOYS USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

Balyakin I.A.<sup>1,2</sup>, Rempel A.A.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Institute of Metallurgy of UB RAS, Ekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> NANOTECH Centre, Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

Atomistic simulation of multi-component melt using high-dimensional neural network potential was performed using classical molecular dynamics. Ab initio and neural network simulations were compared. Parameters of solidification of the multi-component melt into high-entropy alloy were computed.

Высоко-энтропийные сплавы (ВЭСы), по определению, являются сплавами, содержащими не менее 5 компонентов, представленных в атомных долях не меньших 5 % и не больших 35 %. При этом ВЭСы должны представлять собой неупорядоченный твердый раствор замещения [1]. В настоящее время одним из самых популярных методов синтеза ВЭСов является дуговая плавка. То есть благодаря тепловому эффекту электрической дуги исходные чистые компоненты плавятся и, в последствии перемешавшись, начинают представлять собой многокомпонентный расплав. Свойства ВЭСов зависят от свойств исходного расплава, таким образом, знание свойств расплава может помочь в прогнозировании свойств ВЭСа.

Структурные и динамические характеристики жидкостей, в том числе и расплавов, могут быть определены при помощи метода молекулярной динамики – метода, который позволяет исследовать временную эволюцию системы взаимодействующих атомов путём интегрирования их уравнений движения. Взаимодействие между атомами может быть задано при помощи заранее определенных

потенциалов взаимодействия (классическая молекулярная динамика), так же силы, действующие на атомы, могут быть посчитаны исходя из информации об электронной подсистеме (первопринципная молекулярная динамика (*ab initio molecular dynamics* – AIMD)). Проблемой классической молекулярной динамики многокомпонентных систем является необходимость задания большого числа параметров взаимодействия, которые зачастую не могут быть определены. От этого недостатка избавлена AIMD, в которой явно учитывается электронная подсистема. Основным недостатком метода AIMD является его низкая производительность, что ограничивает моделируемые системы как в числе атомов, так и во временной протяженности траектории, которая может быть посчитана.

Проведение расчетов методом классической молекулярной динамики с использованием потенциалов, сконструированных на основе AIMD расчетов помогает объединить преимущества обоих методов и исключить их недостатки. Относительно новой и достаточно эффективной процедурой конструирования таких потенциалов является метод многомерных нейронных сетей (*high-dimensional neural network potential* – HDNNP) [2]. В данной работе, при помощи метода HDNNP, на основе AIMD расчетов, проведенных в программном обеспечении VASP [3], был разработан многочастичный потенциал классической молекулярной динамики для ряда многокомпонентных расплавов. Затем, при помощи программного обеспечения LAMMPS [4], был проведен молекулярно-динамический расчет тех же расплавов, но уже для большего числа атомов и более длинных траекторий. Расчет в LAMMPS был так же применен для выявления зависимостей структурных и динамических свойств многокомпонентного расплава от температуры. А также, благодаря включению в тренировочный набор для HDNNP различных кристаллических фаз, удалось напрямую смоделировать кристаллизацию ВЭСов из расплава.

*Работа выполнена в соответствии с государственным заданием ИМЕТ УрО РАН, вычисления производились на кластере «Уран» ИММ УрО РАН.*

1. F. Otto, Y. Yang, H. Bei, and E. P. George, *Acta Materialia*, 61(7), 2628–2638 (2013).
2. J. Behler and M. Parrinello, *Physical Review Letters*, 98(14), 146401 (2007).
3. G. Kresse and J. Furthmüller, *Physical Review B*, 54(16), 11169–11186 (1996).
4. S. Plimpton, *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1–19 (1995).