

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОСФОРЕНА МЕТОДОМ КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЛУБОКОГО ОБУЧЕНИЯ

Шеин Д.В.¹, Завьялов Д.В.¹, Жариков Д.Н.¹

¹) Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет», Волгоград, Российская Федерация
E-mail: danil.shein2013@yandex.ru

MODELING OF PHOSPHORENE WITH CLASSICAL MOLECULAR DYNAMICS USING DEEP LEARNING

Shein D.V.¹, Zavyalov D.V.¹, Zharikov D.N.¹

¹) Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Volgograd State Technical University", Volgograd, Russian Federation

The resulting single-layer phosphorene model created by classical molecular dynamic simulation and deep learning package has properties of the real material.

Глубокое обучение широко распространено в современных технологиях, а его использование в физике конденсированного состояния является многообещающим. Так с помощью пакета глубокого обучения DeePMD-kit [1] возможно построить модель силовых полей межатомных взаимодействий различных материалов. В данной работе была предпринята попытка построить таким методом силовые поля фосфорена [2].

Объектами обучения могут быть результаты моделирования *ab initio* молекулярной динамики (МД). В 1985 году Кар и Парринелло предложили метод МД [3], в котором система взаимодействующих электронов и ионов рассматривается совместно, причём движение ядер атомов, задаётся классически, а электронные степени свободы – квантово механическими волновыми функциями.

В пакете программ Quantum-Espresso [4] имеется возможность моделирования методом МД Кара-Парринелло. В качестве элементарной ячейки взят элемент решётки фосфорена, состоящий из 16 атомов (Рисунок 1).

Со сгенерированной моделью силовых полей становится возможным проводить моделирование методом классической МД, в котором численно интегрируются уравнения Ньютона.

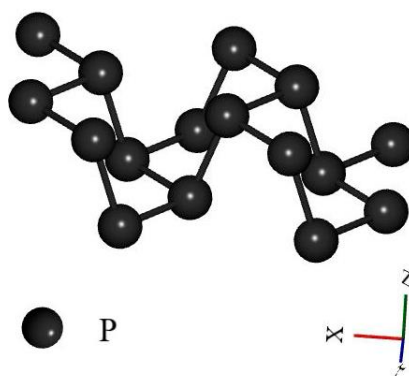


Рис. 1. Элемент кристаллической решётки фосфорена

Для листа фосфорена (система из 1296 атомов) программой LAMMPS [5] было проведено моделирование классической МД. Результаты симуляции показывают стабильность системы во времени. В качестве количественной физической характеристики была взята плотность материала, измеренное значение которой (2.72 г/см^3) очень близко к реальному (2.69 г/см^3).

1. Wang, Han; Zhang, Linfeng; Han, Jiequn; E, Weinan (2018). DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics. Computer Physics Communications. doi:10.1016/j.cpc.2018.03.016 arXiv:1712.03641v2
2. Castellanos-Gomez, Andres; Vicarelli, Leonardo; Prada, Elsa; Island, Joshua O; Narasimha-Acharya, K L; Blanter, Sofya I; Groenendijk, Dirk J; Buscema, Michele; Steele, Gary A; Alvarez, J V; Zandbergen, Henny W; Palacios, J J; van der Zant, Herre S J (2014). Isolation and characterization of few-layer black phosphorus. 2D Materials, 1(2), 025001. doi:10.1088/2053-1583/1/2/025001
3. Car, R. (1985). Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory. , 55(22), 2471–2474. doi:10.1103/PhysRevLett.55.2471
4. <https://www.quantum-espresso.org/>
5. <https://lammps.org/>