

УДК 004.7

ББК 32.973.2.

## **Использование нейронной сети для расчета энергетической и термической стабильности двумерных супракристаллических структур**

**Каренин Алексей Александрович,**

кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры информатики, Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова,

г. Ульяновск, Россия

Технический прогресс может быть достигнут одним из двух путей – совершенствованием старых машин и методов, либо открытием чего-то принципиально иного. Для продвижения по второму пути, как правило, нужно сначала довольно долго идти по первому. В ряде случаев до тупика. Современные реалии требуют материалов имеющих не только весьма специфические физические характеристики, но и даже совокупность двух или более характеристик, не встречающихся в одном материале прежде.

Начиная с открытия графена, человечество задумалось о конструировании (сборке) материала с заранее определенными физическими характеристиками. Зная молекулярную структуру материала, класс симметрии его кристаллической решетки и тип атомов в ее узлах можно с достаточной точностью спрогнозировать физические свойства таких материалов. Полученные таким образом материалы могут обладать уникальным физическим свойством (графен и его сверхпроводимость), но не набором взаимоисключающих параметров и свойств.

Если рассматривать планарные структуры, то: исходя из физических соображений, атомы в таких структурах должны образовывать правильные многоугольники (в силу равнозначности и равновесности связей между

парами одинаковых атомов и стабильности углов гибридизации); из геометрических соображений таких многоугольников – это могут быть 3-, 4-, 5 и 6-ти угольники.

Наибольший интерес могут представлять кристаллические структуры, в узлах примитивной ячейки кристаллической решетки которых будут находиться не отдельные атомы или молекулы, а атомарные комплексы с собственной кристаллической решеткой. Такие структуры называются супракристаллами [1] и благодаря наличию сразу двух кристаллических решеток они могут обладать весьма интересными наборами физических свойств [2].

Супракристаллическая решетка представляет собой одну из сеток Кеплера изображенных на рисунке 1, однако, не все они могут играть роль супракристаллической решетки. [3]

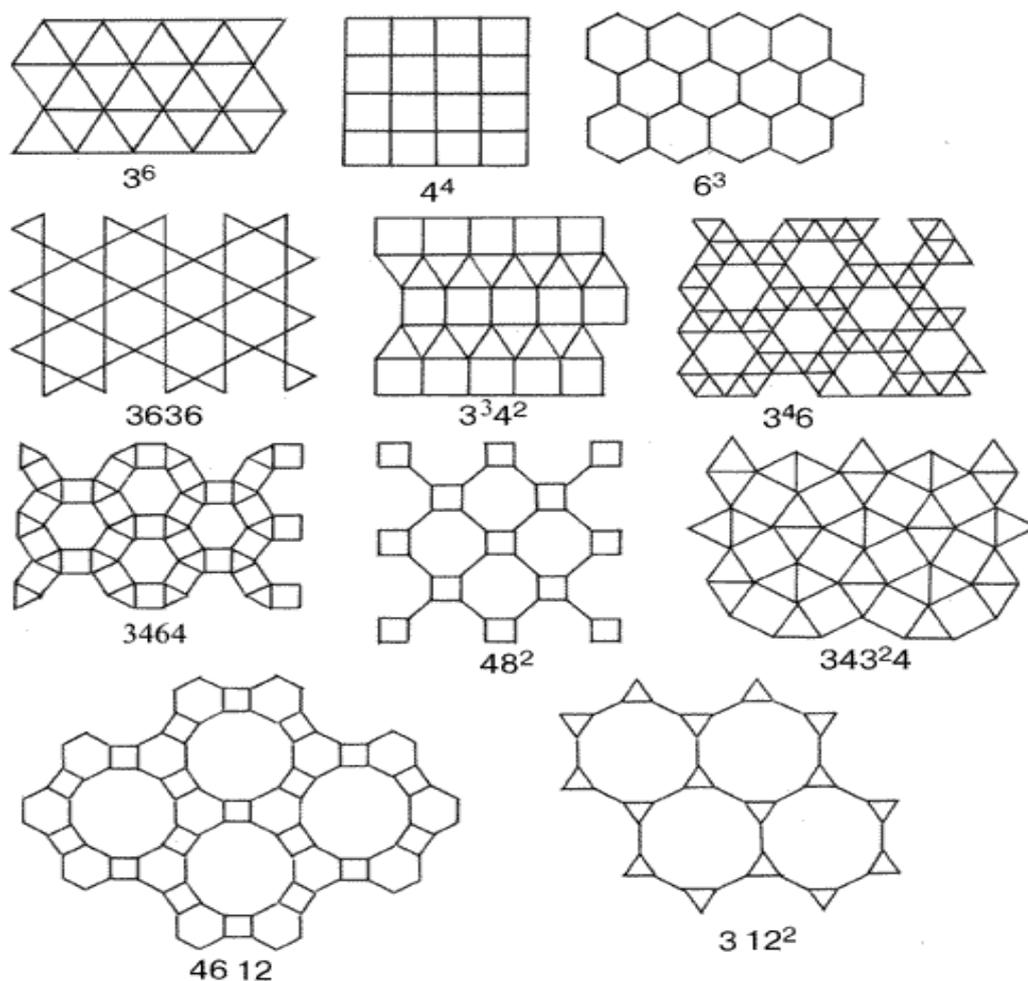
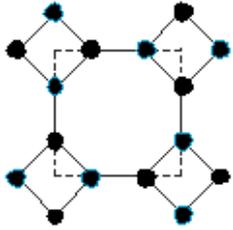
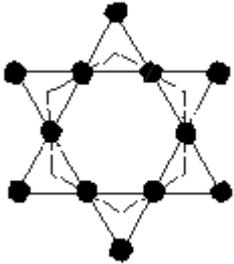
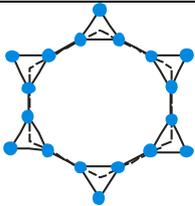
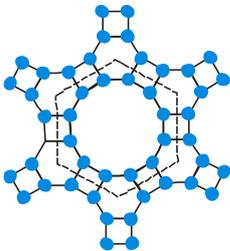


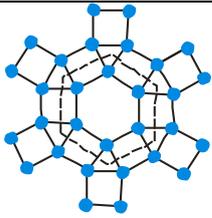
Рисунок 1 Сетки Кеплера

Некоторые из физических свойств кристаллов, имеющих принадлежность к тем или иным точечным группам симметрии, могут быть описаны предельными точечными группами, в которых содержатся оси симметрии бесконечного порядка. Таким образом, зная к какой группе симметрии кристаллов принадлежит проектируемый материал, можно указать возможность наличия или отсутствия в нём некоторых физических свойств.

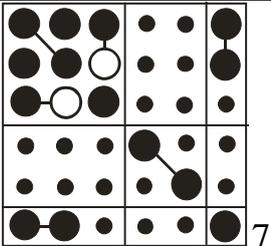
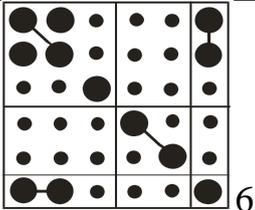
Классы симметрии двумерных супракристаллов представлены в таблице 1.

Таблица 1 Классы симметрии 2D-супракристаллов

Вид структуры	Обозначение Структуры	Сингония	Класс точечной симметрии
	(X)44	Тетрагональная	4mm
	(XY)44	Тетрагональная	4
	(X)63(6)	Гексагональная	6mm
	(X)63(12)	Гексагональная	6mm
	(X)664	Гексагональная	6mm
	(X)634	Гексагональная	6mm

			
	(XY)634	Гексагональная	6

На рисунке 2 можно увидеть матрицы равновесных физических свойств, используя которые можно говорить о наличии или отсутствии тех или иных свойств у проектируемого материала.

<p>Общая структура матрицы</p> <table border="1" style="border-style: dashed;"> <tr> <td></td> <td><math>\sigma</math></td> <td><math>E</math></td> <td><math>\Delta T</math></td> <td></td> </tr> <tr> <td><math>S</math></td> <td><math>s</math></td> <td><math>d_t</math></td> <td><math>\alpha</math></td> <td></td> </tr> <tr> <td><math>D</math></td> <td><math>d</math></td> <td><math>\varepsilon</math></td> <td><math>P</math></td> <td></td> </tr> <tr> <td><math>\Delta S</math></td> <td><math>\alpha_t</math></td> <td><math>p_t</math></td> <td><math>c/T</math></td> <td><math>N</math></td> </tr> </table>			$\sigma$	$E$	$\Delta T$		$S$	$s$	$d_t$	$\alpha$		$D$	$d$	$\varepsilon$	$P$		$\Delta S$	$\alpha_t$	$p_t$	$c/T$	$N$	<p>Обозначения:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• компонента, равная нулю</li> <li>● компонента, отличная от нуля</li> <li>●—● равные компоненты</li> <li>●—○ компоненты, численно равные, но противоположные по знаку</li> </ul> <p>× <math>\{S_1 \Gamma S_2\}</math></p> <p><math>N</math> число независимых компонентов</p>
	$\sigma$	$E$	$\Delta T$																			
$S$	$s$	$d_t$	$\alpha$																			
$D$	$d$	$\varepsilon$	$P$																			
$\Delta S$	$\alpha_t$	$p_t$	$c/T$	$N$																		
Тетрагональная сингония																						
класс 4	класс $4mm$																					
																						
Гексагональная сингония																						

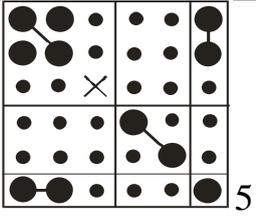
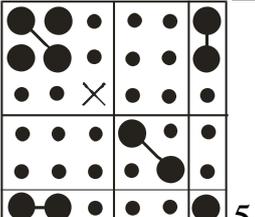
класс 6	класс $6mm$
	

Рисунок 2. Матрицы равновесных физических свойств 2D-супракристаллов

Основной проблемой проектирования наноразмерных кристаллических структур является определение их стабильности. В работах [1,2,3] описано использование комплекса программ abinit с использованием файлов потенциалов и метода Монте-Карло.

Выбор C как основы для супракристаллических структур обусловлен существованием его планарной аллотропной формы – графена. Как близкий к нему рассмотрен атом Si. S, P попали в список так как обладают большим набором аллотропных, устойчивых форм[4]. Однако существование хаекелитных структур на основе связки B-N ставит вопрос о необходимости наличия аллотропных форм[5]. Так алмаз не может образоваться при н.у., однако остается крайне стабильным при них.

Расчет одной структуры, с одним набором атомов на одной сетке без учета краевых эффектов, занимает от нескольких суток до недель. Расчет всех возможных структур с перебором всех возможных комбинаций атомов с учетом возможности поддержания двойных и более связей является не обоснованным ни с точки зрения затраченных ресурсов, ни времени расчета.

Ситуацию может решить использование нейронной сети. Нейронная сеть в общем случае представляет собой некоторую общность процессоров связанных между собой. Такие процессоры играют роль искусственных нейронов и имеют достаточно простую форму и реализацию. Основным плюсом нейронной сети является ее обучаемость.

В нашем случае на вход такой сети предполагается подавать набор необходимых физических свойств для проектируемого материала, а на выходе получать рекомендации по выбору супракристаллической или кристаллической решетки и наборам атомов которые будут стоять в узлах решетки или составлять там же комплексы атомов.

На этапе обучения сети необходимо “скормить” ей как можно больше разнообразных существующих кристаллических структур со всеми их параметрами. В режиме простоя данная сеть продолжит обучаться, поочередно перебирая все возможные комбинации, отдавая приоритет расчету структур имеющих большую вероятность оказаться стабильными, с учетом уже накопленного материала.

Как и любая нейронная сеть, сеть для расчета стабильности кристаллических структур с каждой рассчитанной и введённой структурой корректирует вес связей между нейронами, совершенствуя и улучшая метод поиска нужных параметров проектируемой структуры.

В качестве проверочного инструмента предполагается использовать 2-3 различных комплекса программ для расчета стабильности нано размерных атомарных структур. Использование большего числа программ вызовет нежелательный рост времени расчета, а меньшего приведет к падению степени достоверности полученных данных. Однако, определить точно необходимое количество различных программ для достижения приемлемой точности вычислений представляется возможным только на этапе экспериментальной работы проектируемой среды.

Стоит отметить, что результатом работы такой сети будет служить лишь рекомендация по построению потенциально возможной структуры. Для оценки возможности технической реализации такой структуры и ее стоимости нейронной сети потребуются данные для уже созданных подобных структур и на начальном этапе такие оценки могут быть весьма грубыми. В процессе своей эксплуатации и развития данная нейронная сеть

не только “обучится” делать достоверные прогнозы, но и создаст базу данных по теоритически возможным материалам и их параметрам.

### Список литературы

1. Браже, Р.А. Компьютерное моделирование свойств супракристаллов / Р.А. Браже, А.А. Каренин // Известия ВУЗов. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2011. – Т. 18. – №2. – С.37-52.
2. Браже, Р. А. Математические модели двумерных супракристаллов / Р. А. Браже, А. А. Каренин // Математическое моделирование физических, экономических, технических, социальных систем и процессов, г. Ульяновск / под ред. д.т.н. проф. Ю.В. Полянского. - УлГУ, 2009. – С. 51-52.
3. Браже, Р. А. Упругие характеристики углеродных 2D-супракристаллов в сравнении с графеном / Р. А. Браже, А. А. Каренин, Р. М. Мефтахутдинов // ФТТ. – 2011. – Т.53. – Вып.7 – С.1406–1408.
4. Каренин, А.А. Формирование у студентов современных представлений о фазовых состояниях вещества на примере наноразмерных супракристаллических структур (наноаллотропов) / А.А. Каренин // Материалы международной научно-педагогической конференции Формирование учебных умений УлГПУ им. И.Н. Ульянова, 22-23 апреля 2011, Ульяновск, С. 122-129.
5. Лисенков, С. В. Геометрическая структура и электронные свойства планарных и нанотрубных структур типа “хаекелит” / С. В. Лисенков,
6. Г. А. Виноградов, Н. Г. Лебедев // ФТТ. – 2006. – Т.48. – №. 1.