

Вычисление напряжения кристаллов при больших деформациях

Д.Р. Баймурзина^{1,2}, А.В. Шапеев²¹Московский физико-технический институт (государственный университет)²Сколковский институт науки и технологий

Наноматериалы могут выдерживать большие напряжения в течение длительного периода времени без разрывов и проявления пластичности. Такие большие упругие деформации (около 10%) могут быть получены с помощью эпитаксии [1], фазовых превращений [2], термомеханических процессов [2] или прямой динамической нагрузки [3, 4, 5]. В таком случае контроль над физическими и химическими свойствами материала становится возможным за счет изменения упругой деформации ε . Такой подход называется Elastic Strain Engineering (ESE).

В математическом моделировании *деформация* может быть представлена в виде матрицы смещения, размерности 3×3 . Для моделирования деформации в пределах от $R_1\%$ до $R_2\%$ матрица смещения представляется следующим образом:

$$\begin{pmatrix} 1 + a_0 & a_5 & a_4 \\ a_5 & 1 + a_1 & a_3 \\ a_4 & a_3 & 1 + a_2 \end{pmatrix},$$

где $a_i \in [\frac{R_1}{100}, \frac{R_2}{100}]$, $i \in \overline{0, 5}$. В заданном виде матрица смещения имеет шесть неизвестных. Стоит отметить, что работа с шестимерной переменной предполагает высокую стоимость вычислений.

В виду невозможности экспериментально исследовать весь регион больших деформаций в шестимерном пространстве, подход ESE основан на численном моделировании. Единичный подсчет некоторого свойства материала (такого как ширина запрещенной зоны, зонная структура фононов и прочее) может занимать десятки минут и часов процессорного времени. Поэтому перспективным направлением является применение машинного обучения (machine learning) для приближенного эффективного представления свойств материалов. В частности, полезно было бы создать такие модели напряжения и стабильности кристаллической решетки, которые позволяли бы определять регионы допустимых деформаций.

Начинаясь с работы над материалами с простыми кристаллическими решетками Браве, такими как литий, в дальнейшем данный проект будет охватывать и более сложные решетки, такие как кремний и германий, которые являются наиболее интересными материалами для применения в электронике и фотонике. Нужно заметить, что переход от работы с простыми кристаллическими решетками к более сложным нетривиален: необходимо учитывать релаксацию вектора сдвига решетки, что может привести к сложностям, например, неединственности кристаллической структуры при данной деформации.

Для аппроксимации некоторой функции шести переменных была выбрана идея применения методов машинного обучения. Такие методы являются довольно точными и при этом быстрыми. Методов приближения функции существует большое множество, однако некоторые все равно требуют непосильных временных затрат. Одним из путей решения может быть создание подходящего базиса для функций свойств материала с учетом симметрии. Значительного прогресса в таком подходе уже добились Ривлин, Спенсер, Смит [6], Чжен [7, 8] и другие. Общая концепция - построить неприводимый базис функций шести переменных и представить искомое свойство материала в виде их комбинации.

Кумар и Паркс из Массачусетского Института Технологий [9] создали модель зонной структуры фононов для двумерного материала графена как функцию трехмерного вектора смещения. Предел деформаций для графена принимает форму двумерной параметрической поверхности в трехмерном пространстве деформаций. Возможность численного представления пятимерной поверхности деформации для сыпучих материалов определяет теоретическую применимость ESE.

Существует еще одна сложность в данном направлении - свойства материалов не обязательно являются гладкими, например, вблизи перехода металл-диэлектрик энергия имеет разрывные производные. Это значительно осложняет численное интерполирование - полиномы, как и тензорные произведения, требуют гладкости функции.

В инженерии существует схожий подход и называется суррогатным моделированием [10]. Существует две цели моделирования: хорошо приблизить функцию во всей области и хорошо приблизить функцию только в определенной области значений параметров (и менее аккуратно приблизить ее в остальных областях). Последнее называется традиционной дилеммой эволюционного поиска: *exploration vs exploitation*. Разница между задачами суррогатного моделирования и поставленной задачей в физичности модели. А значит, разработанная модель машинного обучения и процедуры аппроксимации должны учитывать основные симметрии и сингулярности физической модели. Лишь немногая литература посвящена применению суррогатного моделирования к аппроксимации физических моделей, исключение составляют модели межатомного взаимодействия [11, 12] и регрессия функционала плотности в дискретном преобразовании Фурье [13]. Исследование проблем и применимости стандартных методов суррогатного моделирования к регрессии свойств материалов является одной из целей данного проекта.

В данной работе применяются несколько моделей машинного обучения: полиномиальная аппроксимация и тензорные произведения [14]. Целью работы является применение машинного обучения к вычислению свойств кристаллической решетки, а значит, неважно, как вычисляется конкретная характеристика для данной деформации. В таком случае, будем рассматривать *ab initio* вычисления свойств кристаллов как некоторый черный ящик, работающий с определенной точностью. В качестве такого черного ящика в работе используется специальная программа VASP.

Объектом нашего интереса является функция потенциальной энергии, зависящая от симметричной матрицы деформации, то есть шести переменных. Функция потенциальной энергии достаточно гладкая, ее мы и исследуем для проверки точности и эффективности применения такого подхода. Будет рассмотрено два варианта аппроксимации. В обоих случаях в качестве сетки на исследуемом регионе деформации рассмотрим масштабированные корни многочленов Чебышева n степени.

При аппроксимации комбинацией многочленов Чебышева итоговым полиномом аппрокси-

Таблица 1: Сравнительная таблица

n	Standard deviation (meV)	
	Chebyshev interpolation	Tensor train and Chebyshaev interpolation
2	3.33357164779	3.33342070732
3	0.13809279900	0.14000834531
4	0.08709350307	0.12106214779
5	0.04209379317	0.11101869362
6	0.03655512347	0.11489989338

магии будет многочлен $n - 1$ степени. При этом мы вынуждены вычислять значения энергии абсолютно во всех точках сетки, которая при $n = 6$ будет составлять $n^6 = 46\ 656$ точек-деформаций. В качестве итогового представления искомой функции путем применения линейной регрессии получается набор коэффициентов для базиса из многочленов Чебышева, с использованием которого можно вычислять значения функции энергии в любых точках региона с определенной точностью.

Второй вариант аппроксимации подразумевает использование *тензорных поездов*. Для заданной функции вычисления энергии для конкретной матрицы смещения алгоритм строит представление искомой функции в виде тензора - произведения матриц значительного меньшего размера. Данный алгоритм напоминает собой многомерное сингулярное разложение. Также он требует значительно меньше вычислений искомой функции, получая при этом заданную точность - в этом и есть его главное преимущество. Используя полученный тензор, значения которого можно получить лишь в узлах исходной решетки, мы снова приблизим функцию полиномами Чебышева с использованием линейной регрессии, как и в предыдущем случае. Цель состоит в уменьшении затрат на приближение с сохранением требуемой точности.

По результатам можно сказать, что требуемую точность действительно можно достичь существенно сократив количество *ab initio* вычислений искомой функции, каждое из которых занимает несколько минут процессорного времени.

Сравнительные результаты полученной точности приведены в таблице 1. Валидация проводилась на одном и том же образце, состоящем из 1000 матриц деформаций, значения которых лежат вне исследуемой сетки. Необходимая для дальнейшей работы, в частности исследования устойчивости, точность со стандартным отклонением менее 1 meV хорошо достигается с использованием тензорных поездов. Стоит отметить, что в дальнейшем планируется провести подсчеты также и для $n = 7, 8$.

Наиболее важным является то, что в связи с подтверждающейся эффективностью использования тензорных поездов, следующий шаг в работе - применение методики для аппроксимации более сложных свойств кристаллов - динамической матрицы и постоянных сил, которые будут использоваться для определения устойчивости деформированной решетки.

Список литературы

- [1] Rune S Jacobsen и др. “Strained silicon as a new electro-optic material”. в: *Nature* 441.7090 (2006), 199–202.
- [2] Noel Healy и др. “Extreme electronic bandgap modification in laser-crystallized silicon optical fibres”. в: *Nature materials* 13.12 (2014), с. 1122–1127.
- [3] Ju Li, Zhiwei Shan и Evan Ma. “Elastic strain engineering for unprecedented materials properties”. в: *MRS Bulletin* 39.02 (2014), с. 108–114.
- [4] Inkyu Park и др. “Top-down fabricated silicon nanowire sensors for real-time chemical detection”. в: *Nanotechnology* 21.1 (2009), с. 015501.
- [5] MJ Suess и др. “Analysis of enhanced light emission from highly strained germanium microbridges”. в: *Nature Photonics* 7.6 (2013), с. 466–472.
- [6] GF Smith, MMu Smith и RS Rivlin. “Integrity bases for a symmetric tensor and a vector-The crystal classes”. в: *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 12.1 (1963), с. 93–133.
- [7] Q-S Zheng. “Theory of representations for tensor functions—a unified invariant approach to constitutive equations”. в: *Applied Mechanics Reviews* 47.11 (1994), с. 545–587.
- [8] Q-S Zheng и AJM Spencer. “Tensors which characterize anisotropies”. в: *International Journal of Engineering Science* 31.5 (1993), с. 679–693.
- [9] Sandeep Kumar и др. “Multi-scale mechanics of monolayer graphene membranes: elasticity, fracture, and mechanochemistry”. дис. ... док. Massachusetts Institute of Technology, 2015.
- [10] Alexander Forrester, Andras Sobester и Andy Keane. *Engineering design via surrogate modelling: a practical guide*. John Wiley и Sons, 2008.
- [11] J Behler. “Representing potential energy surfaces by high-dimensional neural network potentials”. в: *Journal of Physics: Condensed Matter* 26.18 (2014), с. 183001.
- [12] Albert P Bartók и др. “Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons”. в: *Physical review letters* 104.13 (2010), с. 136403.
- [13] John C Snyder и др. “Orbital-free bond breaking via machine learning”. в: *The Journal of chemical physics* 139.22 (2013), с. 224104.
- [14] Ivan V Oseledets. “Tensor-train decomposition”. в: *SIAM Journal on Scientific Computing* 33.5 (2011), с. 2295–2317.