

ML-потенциалы для описания физической адсорбции H_2 на графене

Созыкин С.А.¹, Бескачко В.П.¹

sozykinsa@susu.ru

¹ ЮУрГУ (НИУ), Челябинск, Россия

Физическая адсорбция молекулярного водорода на углеродных поверхностях определяется слабыми дисперсионными взаимодействиями с характерной энергией порядка 40–60 мэВ и равновесным расстоянием около 3 Å. Корректное описание такой сорбции в рамках теории функционала плотности требует явного учета вкладов взаимодействий Ван-дер-Ваальса. Современные исследования адсорбции водорода на графене и родственных 2D-материалах показывают, что энергия взаимодействия H_2 с идеальной поверхностью графена оказывается чувствительна к выбранной вычислительной схеме и учету дисперсионных поправок, что подробно обсуждается в обзоре [1]. В классической молекулярной динамике адсорбция H_2 на углеродных поверхностях обычно описывается с использованием потенциалов типа Леннарда-Джонса с различными наборами параметров. Сопоставление с первопринципными расчетами показывает, что корректное воспроизведение глубины и формы потенциальной ямы требует специальной параметризации таких моделей. Так, в работе [2] было выполнено сравнение DFT-расчетов и молекулярной динамики с использованием улучшенного потенциала Леннарда-Джонса для адсорбции H_2 на C_{60} , продемонстрировавшее возможность достижения количественного согласия при соответствующей настройке параметров.

В настоящей работе в рамках метода DeePMD был разработан машинно-обучаемый межатомный потенциал для описания сорбции H_2 на графене и родственных ему структурах. Первопринципные расчеты выполнялись в пакете VASP с использованием функционала PBE и дисперсионной поправки Grimme-D3. База данных формировалась в режиме активного обучения и включала конфигурации с различными ориентациями молекулы и расстояниями H_2 -поверхность в области физической адсорбции. Потенциалы были построены в рамках нескольких архитектур: модели с двухчастичным дескриптором, а также с механизмом внимания DPA-2 и DPA-3.

Построенные ML-потенциалы корректно воспроизводят профиль потенциальной энергии адсорбции, глубину минимума и рельеф потенциальной поверхности вдоль плоскости графена, демонстрируя согласие с DFT (PBE-D3) в пределах нескольких мэВ. Использование архитектур с механизмом внимания обеспечило более точное описание кривизны потенциальной ямы по сравнению с базовой двухчастичной моделью. Полученные результаты показали, что современные ML-архитектуры способны адекватно описывать системы, в которых доминируют слабые дисперсионные взаимодействия, и могут быть использованы для масштабного моделирования процессов адсорбции и поверхностной диффузии молекулярного водорода на углеродных материалах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 25-22-20023, <https://rscf.ru/project/25-22-20023/>

Ссылки

1. C.S. Bongu, S. Tasleem, M.R. Krishnan, E.H. Alsharaeh, Sustainable Energy Fuels (2024) **8**, 4039–4070.
2. M.T. Aziz, W.A. Gill, M.K. Khosa, S. Jamil, M.R.S.A. Janjua, RSC Advances (2024) **14**, 36546–36556.