

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ГИДРИДОВ ТИТАНА ПРИ ПОМОЩИ МАШИННО-ОБУЧЕННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

П.В. Чирков^{1,2}, А.А. Мирзоев²

¹ Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», г. Снежинск, Российской Федерации

² Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российской Федерации
E-mail: chirkovpv@vniitf.ru, mirzoevaa@susu.ru

Аннотация. Исследование гидридов титана представляет интерес как с точки зрения изучения процессов водородного охрупчивания сплавов титана, так и создания перспективных металлических систем хранения водорода. Система Ti-H имеет фазовую диаграмму, в которой происходит фазовое превращение из ГЦК в тетрагональную ГЦТ кристаллическую решетку. Для исследования этого перехода было выполнено машинное обучение межатомного потенциала в рамках модели Moment Tensor Potential (MTP). Для построения потенциала, корректно воспроизводящего энергию системы при тетрагональной деформации, был создан обучающий набор данных, содержащий как периодические структуры, так и искаженные конфигурации, полученные при конечных температурах. Для получения потенциала, способного воспроизводить энергетические характеристики при тетрагональном искажении кристаллической решетки, применялась методика активного обучения, заключающаяся в контроле степени экстраполяции потенциала по сравнению с обучающим набором данных и последовательном дообучении MTP. Выполненное молекулярно-динамическое моделирование позволило установить, что температура ГЦТ-ГЦК превращения для дигидрида TiH_2 составляет 487 К, что выше наблюдаемых в экспериментах значений. Также было установлено, что при 300 К тетрагональная решетка гидридов TiH_x образуется при содержании водорода $x > 1,86$.

Ключевые слова: гидриды титана; молекулярная динамика; машинно-обученные потенциалы.

Введение

Титан и его сплавы рассматриваются как перспективные материалы для хранения водорода [1]. Кроме того, определенную актуальность изучение гидридов титана имеет с точки зрения водородного охрупчивания конструкционных материалов. Согласно экспериментальным данным [2], со стехиометрическим составом стабильными являются гидриды с композицией TiH_2 . Фаза δ - TiH_2 имеет кристаллическую структуру типа флюорита с пространственной группой $Fm\bar{3}m$, в которой атомы титана располагаются в гранецентрированной кубической решетке (ГЦК), а водород занимает тетраэдрические междоузлия решетки. При температурах ниже ~ 310 К происходит [3, 4] превращение в гранецентрированную тетрагональную ε -фазу. Кубическая δ - TiH_x фаза также наблюдается и для нестехиометрического содержания водорода при $1,5 < x < 2,0$. Причем превращение в тетрагональную фазу при комнатной температуре 298 К, согласно эксперименту [4], происходит при содержании водорода выше $x = 1,84$. Кроме того, дискуссионным является также вопрос, является ли фаза γ - TiH с соотношением $c/a > 1$ метастабильной или термодинамически устойчивой. Данная структура была обнаружена в некоторых гидрированных образцах (от 1 до 3 ат. % водорода) α -титана (ГПУ-решетка) в виде выделений в α -матрице [5]. Первопринципные расчеты свойств гидридов титана выполнялись неоднократно. Изучались как профили энергий относительно тетрагональной деформации при нулевой температуре [6], так и термодинамические свойства в рамках фононного подхода [7, 8]. В работе [9] в рамках квазигармонического приближения температура ГЦК-ГЦТ превращения для TiH_2 была определена выше 800 К. Учет электронного вклада в свободную энергию Гиббса при конечных температурах, проведенный в работе [10], позволил получить ε - δ переход при 418 К. Фазовые превращения между кубической и тетрагональной фазами с использованием метода молекулярной динамики (МД) для мартенсита Fe-C исследовалось ранее в работах [11–13].

Физика

В последнее десятилетие бурное развитие получил подход по разработке полуэмпирических потенциалов для молекулярно-динамического моделирования с использованием алгоритмов машинного обучения и машинно-обученных межатомных потенциалов (MLIP). В рамках такого подхода потенциалы для описания межатомных взаимодействий строятся не в виде физически обоснованной функциональной зависимости со специально подобранными параметрами, а в виде набора (часто весьма большого) простых с вычислительной точки зрения дескрипторов. Построенные таким образом потенциалы с помощью алгоритмов машинного обучения параметризуются с использованием результатов первопринципных расчетов энергетических и силовых характеристик моделируемых ансамблей и отдельных частиц. В работе [14] было проведено построение машинно-обученного потенциала для системы Ti-H и проведен расчет диффузии и механических свойств гидридов титана с различным содержанием водорода. Работа [15], в которой было выполнено обучение межатомного потенциала с помощью нейросетей, посвящена изучению формирования гидридов с ГЦК решеткой и её кристаллографической связью с матрицей α -Ti. Однако, в обеих работах методике обучения потенциала уделено недостаточно внимания, например, нет сведений ни о размере обучающей выборки, ни о радиусе обрезания потенциала.

С учетом сказанного выше, представляется актуальным построение MLIP-потенциалов для гидридов Ti-H с ГЦК решеткой и МД-моделирование их поведения при конечных температурах для наблюдения ГЦК-ГЦТ превращений и влияния на них содержания водорода.

Обучение машинно-обученного потенциала

Ab initio моделирование титана и его гидридов в данной работе выполнялось в рамках теории функционала плотности (DFT) с псевдопотенциальным подходом. Использовался метод Projector Augmented Wave (PAW) [16], реализованный в пакете Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP) [17–19]. Обменно-корреляционное взаимодействие рассматривалось с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) в формулировке Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [20]. В рассматриваемом псевдопотенциале для титана учитывалось 12 внешних электронов в качестве валентных. Размытие электронных состояний было выбрано в форме Methfessel–Paxton [21] с шириной $\sigma = 0,05$ эВ. Энергии обрезания плоских волн задавалась на уровне 600 эВ. Разбиение первой зоны Бриллюэна в обратном пространстве было задано k -сеткой $4 \times 4 \times 4$ с центром в точке Г, что обеспечивает максимальное расстояние между точками на уровне $0,15 \text{ \AA}^{-1}$.

В данной работе в качестве MLIP модели использовался Moment Tensor Potential (MTP) [22–24] реализованный в пакете MLIP-3 [25] и интегрированный в пакет классической молекулярной динамики LAMMPS [26]. Процедура обучения потенциала заключалась в генерации некоторого количества снимков, взятых из первопринципных молекулярно-динамических траекторий с интервалом в 100 шагов по 1 фс, чтобы избежать корреляций между выбранными конфигурациями. Для этого выполнялись МД расчеты в пакете VASP для систем TiH_x ($x = 2,0, 1,75, 1,5, 1,0$) с различными степенями тетрагональности c/a от 0,95 до 1,05. Размер системы составлял 108 атомов титана, расположенных в узлах ГЦК решетки, а атомы водорода занимали тетраэдрические междоузлия. Причем системы с нестехиометрическим соотношением создавались путем удаления случайных атомов Н в решетке дигидрида титана. Также для создания обучающей выборки выполнялись МД расчеты с различными соотношениями c/a для упорядоченной фазы γ - TiH , а также для системы TiH, в которых водород находился в октаэдрических порах. Всего таким образом было получено 1020 снимков.

Затем мы использовали процедуру активного обучения (Active Learning, AL), подробно представленную в работе [27], которая позволяет эффективным образом покрывать конфигурационное пространство дескрипторов потенциала и, таким образом, проводить дообучение модели только на необходимых конфигурациях. После обучения MTP на основе начальных данных выполнялись МД расчеты, в ходе которых на каждом временном шаге происходило вычисление степени экстраполяции γ на основе подхода D -оптимальности для получаемых атомных конфигураций, которая показывает есть ли в текущей обучающей выборке конфигурация «похожая» на текущее расположение атомов. Если степень экстраполяции γ находилась в области $2 < \gamma < 10$, то, такие конфигурации добавлялись к обучающему набору. Если же γ становилась больше, чем $\gamma_{\text{cr}} = 10,0$, то происходила остановка расчета, поскольку в этом случае высока вероятность попасть в нефизичные области конфигурационного пространства. Эти выбранные снимки исполь-

зовались в DFT для расчета сил, энергии и напряжений. Результаты добавляли в обучающие наборы МТР, после чего происходила дооптимизация коэффициентов МТР, далее МД расчеты продолжались. Итеративная процедура активного обучения выполнялась до тех пор, пока для систем TiH_x ($x = 2,0, 1,75, 1,5, 1,0$) на протяжении 100 тыс МД шагов в расчете не перестанут появляться конфигурации с $\gamma > 2,0$. По мере добавления новых конфигураций в обучающую выборку и улучшения качества работы потенциала температура в расчетах увеличивалась от 300 до 1000 К.

В итоге общее количество снимков при обучении составило 2963 конфигурации и, соответственно, такое же количество значений потенциальных энергий. Количество рассчитанных компонент сил, действующих на атомы титана составило $3 \cdot 2963 \cdot 108 \sim 9 \cdot 10^5$, количество компонент сил, действующих на атомы водорода, менялось в зависимости от концентрации, но имело примерно такой же порядок. Кроме того, для оптимизации потенциала использовались значения тензора напряжений (только его вириальная часть). Причем относительные веса для энергий, сил и давлений равнялись 1, 0,25, 0,25 соответственно. Радиус обрезания потенциала был выбран на уровне 5,0 Å, причем для больших значений r_{cut} вплоть до 6,0 Å не было отмечено увеличение точности оптимизации МТР, что свидетельствует о короткодействующем характере взаимодействия в гидридах титана. Радиус обрезания $r_{\text{cut}} = 5,0$ Å обеспечивает рассмотрение для ГЦТ-фазы TiH_2 74 ближайших соседей, из которых 18 атомов являются титаном. Для изучения свойств гидридов титана с различным содержанием водорода были обучены МТР различных уровней, для которых в таблице приведены значения ошибок для энергий и сил на обучающем наборе данных. Для дальнейших расчетов нами был выбран потенциал 22 уровня, содержащий 421 числовых коэффициента, определенных в ходе оптимизации.

**Среднеквадратичные ошибки (СКО) по силам (F) и энергии (E)
при обучении МТР потенциалов различного уровня**

«уровень» МТР	кол-во коэффициентов	СКО E , мэВ/атом	СКО F , мэВ/Å
16	130	13,6	163
18	201	8,42	127
20	295	5,17	108
22	421	3,52	99
24	581	3,16	96

На рис. 1, *a–в* построены парные диаграммы энергий и сил, действующих на атомы водорода и титана для сравнения МТР-22 и обучающего набора DFT расчетов. Видно, что значения энергий на рис. 1 *a* группируются в виде обособленных участков. Это объясняется тем, что обучение выполнялось для фиксированного набора концентраций водорода в достаточно узком интервале температур ниже 1000 К. Как следует из рис. 1 *б, в*, построенные МТР-потенциалы значительно точнее воспроизводят силы, действующие на атомы водорода, в сравнении с силами на атомах титана.

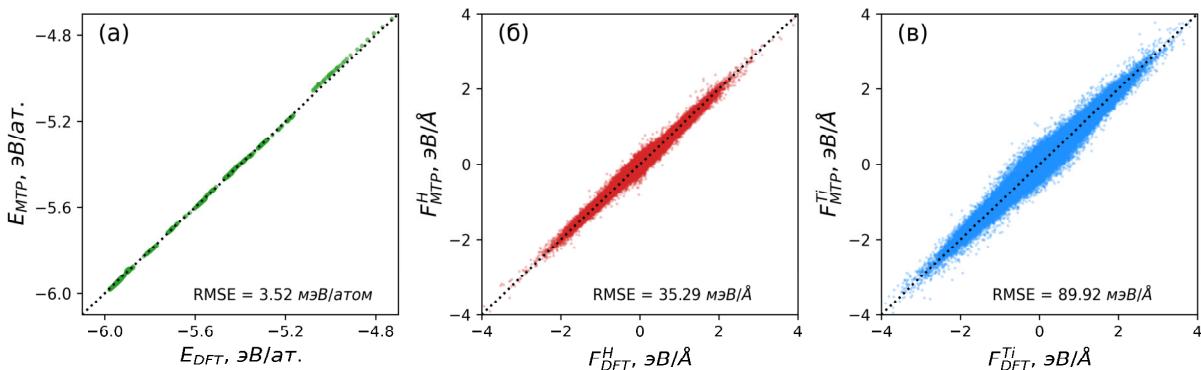


Рис. 1. Сравнение построенного МТР с обучающими данными DFT-расчетов для энергий (а), компонент сил, действующих на атомы водорода (б) и титана (в).

Сравнение результатов МТР с DFT было выполнено для упорядоченного моногидрида $\gamma\text{-TiH}$ и дигидрида TiH_2 . Расчеты проводились без учета влияния конечных температур, выполнялась одноосная деформация вдоль оси c при сохранении объема и условии $a = b$. На рис. 2 представ-

лены зависимости потенциальной энергии для различных значений c/a . Решетка моногидрида оказывается стабильной при $c>a$, с осевым соотношением $c/a = 1,10$. В то же время для TiH_2 характерен сложный профиль энергии с минимумами в двух точках: $c/a = 0,92$ и $1,07$. Построенный МТР хорошо воспроизводит энергию моногидрида, в то время как для дигидрида энергия оказывается слегка сдвинута относительно DFT-результатов на $0,2$ кДж/моль (~ 2 мэВ/атом), хотя общий вид профиля энергии вдоль деформации c/a предсказывается верно.

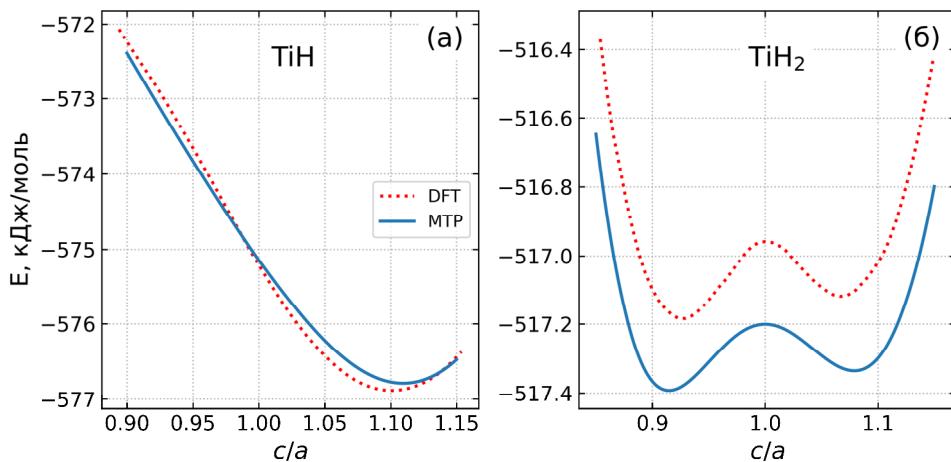


Рис. 2. Потенциальная энергия МТР в сравнении с DFT расчетами для различного тетрагонального искажения c/a кристаллических решеток TiH (а) и TiH_2 (б).

Молекулярно-динамическое моделирование

Расчеты превращения при увеличении температуры для TiH_2 из тетрагональной решетки в кубическую проводились для систем, содержащих 4 000 атомов титана и 8 000 водорода. Для фиксированного значения T система удерживалась в NPT ансамбле на протяжении 40 тыс. шагов молекулярной динамики по 0,5 фс каждый, за вторую половину расчета проходило усреднение длины системы. Внешнее давление баростата задавалось нулевым, причем размеры системы могли изменяться независимо друг от друга, что обеспечило формирование анизотропной тетрагональной структуры. На рис. 3 представлены результаты молекулярно-динамических расчетов, из полученных данных видно, что при температурах выше ~ 487 К стабильной является кубическая кристаллическая решетка. Полученные результаты несколько выше экспериментальных данных [3, 4], согласно которым ГЦТ-ГЦТ превращение происходит при 310–314 К. Данная разница может объясняться отсутствием в DFT расчётах, использованных для обучения МТР, рассмотрения возбуждения электронных степеней свободы, связанных с конечными температурами.

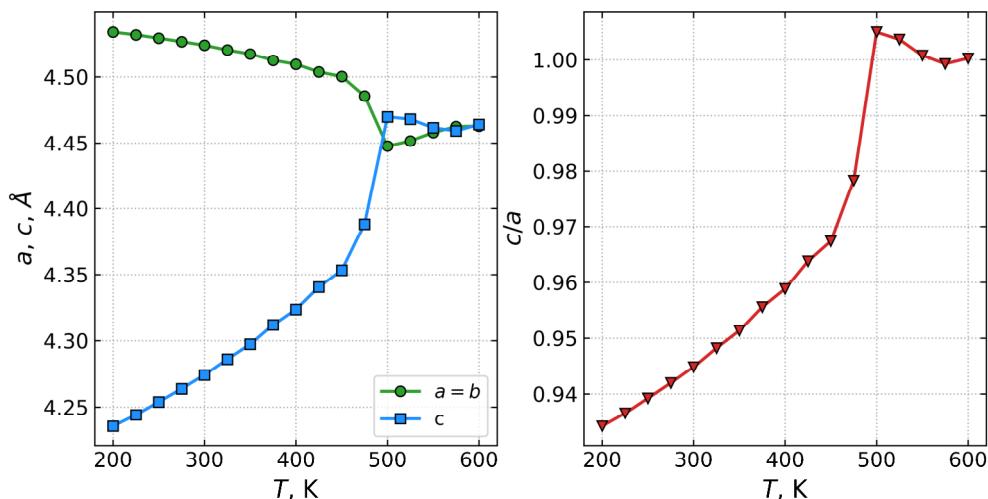


Рис. 3. МД расчеты с помощью МТР параметров решетки и тетрагонального соотношения c/a дигидрида титана для различных температур

Для гидридов вида TiH_x МД расчеты проводились в похожей манере, расчетная система также содержала 4 000 атомов титана при концентрации водорода $1,5 \leq x \leq 2,0$. Определенное число атомов H, соответствующее заданному содержанию x , имело случайное распределение по тетрагональным междоузлиям ГЦК решетки. Температура в расчетах поддерживалась равной 300 К. Из рис. 4 видно, что образование тетрагональной структуры происходит при содержании водорода $x = 1,86$, что хорошо согласуется с экспериментальным значением 1,84 [4].

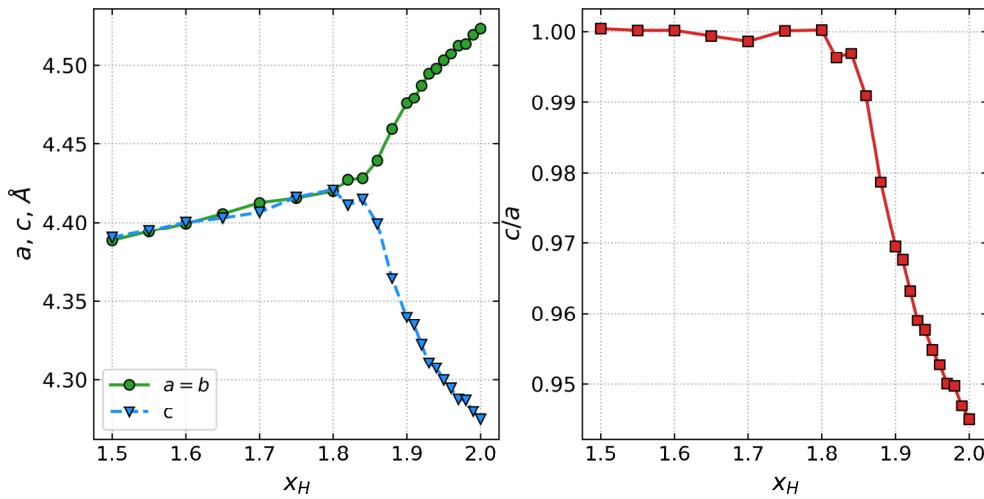


Рис. 4. Параметры решетки и осевое отношение c/a при $T=300$ К для гидридов с нестехиометрическим составом TiH_x .

Заключение

В данной работе исследовались фазовые превращения в системе титан-водород. Для выполнения молекулярно-динамического моделирования на уровне точности первопринципных расчетов было выполнено построение машинно-обученного межатомного потенциала в рамках модели МТР. Для его параметризации в рамках DFT расчетов был создан обучающий набор данных, содержащий 2963 конфигурации. Обученный МТР, содержащий 421 подгоночных коэффициента демонстрирует среднеквадратичное отклонение по энергии 3,52 мэВ/атом и 99 мэВ/Å для проекций сил. Построенный MLIP верифицировался на данных по энергии упорядоченных структур TiH и TiH_2 . Сравнение с первопринципными расчетами показывает хорошее согласие по энергии при одноосной деформации решетки.

Выполненное молекулярно-динамическое моделирование с машинно-обученным межатомным потенциалом в рамках модели МТР позволило оценить температуру ГЦТ-ГЦК превращения для дигидрида TiH_2 , которая составила 487 К, что несколько выше наблюдавших в экспериментах значений ~310 К [3,4]. Установлено также, что при 300 К тетрагональная решетка образуется для содержаний водорода больших чем 1,86, что согласуется с экспериментальным значением 1,84 [4].

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 25-22-20062.

Литература

1. Research Progress in Solid-State Hydrogen Storage Alloys: A review / K. Chen, M.Y. Lau, X. Luo *et al.* // Journal of Materials Science and Technology. – 2026. – Vol. 246. – P. 256–289.
2. San-Martin, A. The H-Ti (Hydrogen-Titanium) System / A. San-Martin, F.D. Manchester // Bulletin of alloy phase diagrams. – 1982. – Vol. 8, Iss. 1. – P. 30–42.
3. Yakel, H.L. Thermocrystallography of Higher Hydrides of Titanium and Zirconium / H.L. Yakel // Acta Crystallographica. – 1958. – Vol. 11, Iss. 1. – P. 46–51.
4. Korn C. NMR Study Comparing the Electronic Structures of ZrH_x and TiH_x . / C. Korn // Physical Review B. – 1983. – Vol. 28, Iss. 1. – P. 95.
5. Numakura, H. Hydride Precipitation in Titanium / H. Numakura, M. Koiwa // Acta metallurgy. – 1984. – Vol. 32, Iss. 10. – P. 1799–1807.
6. Wolf, W. First-Principles Investigations of Transition Metalhydrides, TH_2 : T= Sc, Ti, V, Y, Zr, Nb; Energetics Andchemical Bonding / W. Wolf, P. Herzig // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2000. – Vol. 12, no 21. – 4535.

Физика

7. Ab initio Thermodynamics Investigation of Titanium Hydrides / P.A.T. Olsson, J. Blomqvist, C. Bjorken, A.R. Massih // Computational Materials Science. – 2015. – Vol. 97. – P. 263–275.
8. Hydrogen Solubility in HCP Titanium with the Account of Vacancy Complexes and Hydrides: A DFT study / D.O. Poletaev, D.A. Aksyonov, D. Duy Vo, A.G. Lipnitskii // Computational Materials Science. – 2016. – Vol. 114. – P. 199–208.
9. Xu, Q. First-Principles Investigation of Metal-Hydride Phase Stability: The Ti-H System / Q. Xu, A. Van der Ven // Physical Review B. 2007. – Vol. 76, Iss. 6. – 064207.
10. First-Principles Investigation of the Structure and Thermodynamic Properties of Titanium Hydrides / J. Zhang, H. Dong, X. Dong, X. Li // Computational Materials Science. – 2024. – Vol. 238. – 112851.
11. Mirzaev, D.A. Ordering of Carbon Atoms in Free Martensite Crystals and when Enclosed in Elastic Matrix / D.A. Mirzaev, A.A. Mirzoev, P.V. Chirkov // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2016. – Vol. 47, Iss. 2. – P. 637–640.
12. Чирков, П.В. Роль напряжения и температуры в z-упорядочении атомов углерода в решетке мартенсита / П.В. Чирков, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Физика Металлов и Металлургия. – 2016. – Т. 117, № 11. – С. 1181–1187.
13. Chirkov, P. Carbon Ordering in Martensite Lattice under External Stress: Thermodynamic Theory and Molecular Dynamics Simulation / P. Chirkov, A. Mirzoev, D. Mirzaev // Physica Status Solidi B. – 2018. – Vol. 255, Iss. 7. – 1700665.
14. Mechanical properties and hydrogen diffusion behaviors of metal hydrides from molecular dynamics simulations / F. Yu, X. Xia, C. Xu *et al.* // International Journal of Hydrogen Energy. – 2024. – Vol. 81. – P. 1288–1298.
15. Dissecting the Phase Transformation Mechanism of Titanium Hydride at Atomic Scale / X.-Y. Zhou, W. Lu, X. Peng *et al.* // Acta Materialia. – 2025. – Vol. 288. – 120856.
16. Blöchl, P.E. Projector Augmented-Wave Method / P.E. Blöchl // Physical Review B. – 1994. – Vol. 50, Iss. 24. – P. 17953–17979.
17. Kresse, G. Ab initio Molecular Dynamics for Openshell Transition Metals / G. Kresse, J. Hafner // Physical Review B. – 1993. – Vol. 48. – P. 13115.
18. Kresse, G. Efficiency of Ab-initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // Computational Materials Science. – 1996. – Vol. 6, Iss. 1. – P. 15.
19. Kresse, G. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations using a Plane-Wave Basis Set / G. Kresse, J. Furthmüller // Physical Review B. – 1996. – Vol. 54. – P. 11169.
20. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Physical Review Letters. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865.
21. Methfessel, M.P. High-Precision Sampling for Brillouin-Zone Integration in Metals / M.P. Methfessel, A. Paxton // Physical Review B. – 1989. – Vol. 40, Iss. 6. – P. 3616.
22. Shapeev, A.V. Moment Tensor Potentials: A Class of Systematically Improvable Interatomic Potentials / A.V. Shapeev // Multiscale Modeling and Simulations. – 2016. – Vol. 14, Iss. 3. – P. 1153.
23. Accelerating Crystal Structure Prediction by Machine-Learning Interatomic Potentials with Active Learning / E.V. Podryabinkin, E.V. Tikhonov, A.V. Shapeev, A.R. Oganov // Physical Review B. – 2019. – Vol. 99. – 064114.
24. The MLIP Package: Moment Tensor Potentials with MPI and Active Learning / I.S. Novikov, K. Gubaev., E.V. Podryabinkin, A.V. Shapeev // Machine Learning: Science and Technology. – 2020. – Vol. 2, no. 2. – 025002.
25. MLIP-3: Active Learning on Atomic Environments with Moment Tensor Potentials / E. Podryabinkin, K. Garifullin, A. Shapeev, I. Novikov // Journal of Chemical Physics. – 2023. – Vol. 159. – 084112.
26. LAMMPS-a Flexible Simulation Tool for Particle-Based Materials Modeling at the Atomic, Meso, and Continuum Scales / A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger *et al.* // Computer Physics Communications. – 2022. – Vol. 271. – 108171.
27. Podryabinkin, E.V. Active Learning of Linearly Parametrized Interatomic Potentials / E.V. Podryabinkin, A.V. Shapeev // Computational Materials Science. – 2017. – Vol. 140. – P. 171–180.

Поступила в редакцию 22 октября 2025 г.

Сведения об авторах

Чирков Павел Владимирович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация; научный сотрудник, Управление научной и инновационной деятельностью, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: chirkovpv@vniitf.ru.

Мирзоев Александр Аминулаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физики наноразмерных систем, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация, e-mail: mirzoevaa@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2026, vol. 18, no. 1, pp. 91–99

DOI: 10.14529/mmp260110

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF TITANIUM HYDRIDE STABILITY USING MACHINE-LEARNED POTENTIALS

P.V. Chirkov^{1,2}, A.A. Mirzoev²

¹ Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Technical Physics named after Academician E.I. Zababakhin, Sniezhinsk, Russian Federation

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation,
E-mail: chirkovpv@vniitf.ru, mirzoevaa@susu.ru

Abstract. Studies into of titanium hydrides are important for understanding hydrogen embrittlement processes in titanium alloys and developing promising metallic hydrogen storage systems. The Ti-H system has a phase diagram characterized by a phase transformation from a FCC to a tetragonal FCT crystal lattice. This transition was studied using machine learning of the interatomic potential based on the Moment Tensor Potential (MTP) model. To construct a potential able to accurately reproduce the energies of the system under tetragonal deformation, we created a training dataset containing both periodic structures and distorted configurations obtained at finite temperatures. To obtain a potential able to reproduce energy characteristics under tetragonal lattice distortion, we used an active learning technique, which controlled the degree of potential extrapolation compared to the training dataset and sequentially retrained the MTP. Molecular dynamics simulations have revealed that the FCT-FCC transformation temperature for TiH_2 dihydride is 487 K, which is higher than experimentally observed values. We also found that at 300 K, a tetragonal lattice of TiH_x hybrids is formed at a hydrogen content greater than 1,86.

Keywords: titanium hydrides; molecular dynamics; machine-learned potentials.

References

1. Chen K., Lau M.Y., Luo X., Huang J., Ouyang L., Yang X.S. Research Progress in Solid-State Hydrogen Storage Alloys: A review. *Journal of Materials Science and Technology*, 2026, Vol. 246, pp. 256–289. DOI: 10.1016/j.jmst.2025.05.037
2. San-Martin A., Manchester F.D. The H-Ti (Hydrogen-Titanium) System. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1982, Vol. 8, Iss. 1, pp. 30–42. DOI: 10.1007/BF02868888
3. Yakel H.L. Thermocrystallography of Higher Hydrides of Titanium and Zirconium. *Acta Crystallographica*, 1958, Vol. 11, Iss. 1, pp. 46–51. DOI: 10.1107/S0365110X58000098
4. Korn C. NMR Study Comparing the Electronic Structures of ZrH_x and TiH_x . *Physical Review B*, 1983, Vol. 28, Iss. 1, p. 95. DOI: 10.1103/PhysRevB.28.95
5. Numakura H., Koiwa M. Hydride Precipitation in Titanium. *Acta metallurgy*, 1984, Vol. 32, Iss. 10, pp. 1799–1807. DOI: 10.1016/0001-6160(84)90236-0
6. Wolf W., Herzig P. First-Principles Investigations of Transition Metal dihydrides, TH_2 : $\text{T} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Y}, \text{Zr}, \text{Nb}$; Energetics Andchemical Bonding. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2000, Vol. 12, no. 21, 4535. DOI: 10.1088/0953-8984/12/21/301

Физика

7. Olsson P.A.T., Blomqvist J., Bjerken C., Massih. A.R. Ab initio Thermodynamics Investigation of Titanium Hydrides. *Computational Materials science*, 2015, Vol. 97, pp. 263–275. DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.10.029
8. Poletaev D.O., Aksyonov D.A., Duy Vo D., Lipnitskii A.G. Hydrogen Solubility in HCP Titanium with the Account of Vacancy Complexes and Hydrides: A DFT study. *Computational Materials Science*, 2016, Vol. 114, pp. 199–208. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.12.037
9. Xu Q., Van der Ven A. First-Principles Investigation of Metal-Hydride Phase Stability: The Ti-H System. *Physical Review B*, 2007, Vol. 76, Iss. 6, 064207. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.064207
10. Zhang J., Dong H., Dong X., Li X. First-Principles Investigation of the Structure and Thermo-dynamic Properties of Titanium Hydrides. *Computational Materials Science*, 2024, Vol. 238, 112851. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.112851
11. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Chirkov P.V. Ordering of Carbon Atoms in free Martensite Crystals and when Enclosed in Elastic Matrix. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016, Vol. 47, Iss. 2, pp. 637–640. DOI: 10.1007/s11661-015-3258-9
12. Chirkov P.V., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Role of Stresses and Temperature in the Z-Ordering of Carbon Atoms in the Martensite Lattice. *Physics of Metals and Metallography*, 2016, Vol. 117, Iss 11, pp. 1138–1143. DOI: 10.1134/S0031918X16110041
13. Chirkov P., Mirzoev A., Mirzaev D. Carbon Ordering in Martensite Lattice under External Stress: Thermodynamic Theory and Molecular Dynamics Simulation. *Physica Status Solidi B*, 2018, Vol. 255, Iss. 7, 1700665. DOI: 10.1002/pssb.201700665
14. Yu F., Xia X., Xu C., Zu X., Hu S. Mechanical Properties and Hydrogen Diffusion Behaviors of Metal Hydrides from Molecular Dynamics Simulations. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, Vol. 81, pp. 1288–1298. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.07.331
15. Zhou X.-Y., Lu W., Peng X., Zhuang X., Wang M., Yang X.S., Ye S. Wu H. Dissecting the Phase Transformation Mechanism of Titanium Hydride at Atomic Scale. *Acta Materialia*, 2025, Vol. 288, 120856. DOI: j.actamat.2025.120856
16. Blöchl, P.E. Projector Augmented-Wave Method/ Physical Review B, 1994, Vol. 50, Iss. 24, pp. 17953–17979. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.17953
17. Kresse G., Hafner J. Ab initio Molecular Dynamics for Openshell Transition Metals. *Physical Review B*, 1993, Vol. 48, P. 13115. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.13115
18. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of Ab-initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set. *Computational Materials Science*, 1996, Vol. 6, Iss. 1, p. 15. DOI: 10.1016/0927-0256(96)00008-0
19. Kresse G., Furthmüller J. Efficient Iterative Schemes for Ab initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Physical Review B*, 1996, Vol. 54, P. 11169. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169
20. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 1996, Vol. 77, P. 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
21. Methfessel M.P., Paxton A.T. High-Precision Sampling for Brillouin-Zone Integration in Metals. *Physical Review B*, 1989, Vol. 40, Iss. 6, P. 3616. DOI: 10.1103/PhysRevB.40.3616
22. Shapeev A.V. Moment Tensor Potentials: A Class of Systematically Improvable Interatomic Potentials. *Multiscale Modeling and Simulations*, 2016, Vol. 14, Iss. 3, P. 1153. DOI: 10.1137/15M1054183
23. Podryabinkin E.V., Tikhonov E.V., Shapeev A.V., Oganov A.R. Accelerating Crystal Structure Prediction by Machine-Learning Interatomic Potentials with Active Learning. *Physical Review B*, 2019, Vol. 99, 064114. DOI: 10.1103/PhysRevB.99.064114
24. Novikov I.S., Gubaev K., Podryabinkin E.V., Shapeev A.V. The MLIP package: Moment Tensor Potentials with MPI and Active Learning. *Machine Learning: Science and Technology*, 2020, Vol. 2, no. 2, 025002. DOI: 10.1088/2632-2153/abc9fe
25. Podryabinkin E., Garifullin K., Shapeev A., Novikov I. MLIP-3: Active Learning on Atomic Environments with Moment Tensor Potentials. *Journal of Chemical Physics*, 2023, Vol. 159, 084112. DOI: 10.1063/5.0155887
26. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M., Crozier P.S., in 't Veld P.J., Kohlmeyer A., Moore S.G., Nguyen T.D., Shan R., Stevens M.J., Tranchida J., Trott C.,

Plimpton S.J. LAMMPS-a Flexible Simulation Tool for Particle-Based Materials Modeling at the Atomic, Meso, and Continuum Scales. *Computer Physics Communications*, 2022, Vol. 271, 108171. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171

27. Podryabinkin E.V., Shapeev A.V. Active Learning of Linearly Parametrized Interatomic Potentials. *Computational Materials Science*, 2017, Vol. 140, P. 171–180. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.08.031

Received October 22, 2025

Information about the authors

Chirkov Pavel Vladimirovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Researcher, FSUE “Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Technical Physics named after Academician E.I. Zababakhin”, Snezhinsk, Russian Federation; Researcher, Department of Scientific and Innovation Activities, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: chirkovpv@vniitf.ru.

Mirzoev Aleksandr Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Physics of Nanoscale Systems Department, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, e-mail: mirzoevaa@susu.ru, ORCID iD: <https://orcid.org/0000-0002-1527-371X>.