

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ АВТОНОМНЫХ СТРУКТУР МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ РЗМ

А.С. Попов, А.В. Обходский

Томский политехнический университет, Физико-технический институт
art707@tpu.ru

Введение

Рост производительности вычислительной техники дает больше возможностей для выполнения расчетов. Одновременно с этим развивается теоретическая база, задачи которой направлены на оптимизацию существующих и создание новых методов расчетной оценки свойств атомных структур. Практически всегда существует спрос на новые материалы с уникальными свойствами, применяемые в самых разных областях.

Преимущества от применения средств компьютерного моделирования свойств новых материалов перед экспериментом значительны. Получение теоретических значений о свойствах того или иного материала освобождает исследователей от ручных расчетов. С другой стороны, можно использовать компьютерное моделирование при исследовании свойств уже существующих материалов. В любом случае моделирование является выгодным как экономически, так и по временным затратам. К тому же, если использовать распределенные вычисления, то время моделирования существенно сокращается. У существующих программных комплексов распределенные вычисления либо отсутствуют, либо достигаются путем установки дополнительного программного обеспечения, которое уникально для различных платформ.

Методы расчета атомных структур

Наиболее известными из неэмпирических методов являются метод Хартри-Фока (ХФ) и теория функционала плотности (ТФП). Метод ХФ предшествовал созданию метода ТФП и был вполне самодостаточным в части состава определяемых свойств и точности. Однако это выполнялось только для элементарных соединений и элементов. Уже при расчетах средних систем сложность математического аппарата росла экспоненциально, следовательно, росла и ресурсоемкость. Вдобавок ко всему, значительно снижалась точность вычислений [1]. Потеря точности в методе ХФ обусловлена тем, что он не учитывает корреляции электронов (влияние электронов друг друга). Существуют модифицированные методы ХФ, где эта корреляция учтена, однако, в сравнении с методом ТФП, они проигрывают в скорости вычислений [2]. Причиной является то, что метод ХФ описывает систему многоэлектронной волновой функцией, в то время как метод ТФП описывает ее электронной плотностью. Следует отметить, что метод ТФП не

является аналитическим и достоверным, об этом свидетельствует работа [3], посвященная утверждениям, озвученными В. Коном (где кратко описаны основы ТФП) на нобелевской лекции.

Схема последовательности расчетов свойств материалов может быть обобщена как показано на рисунке 1.

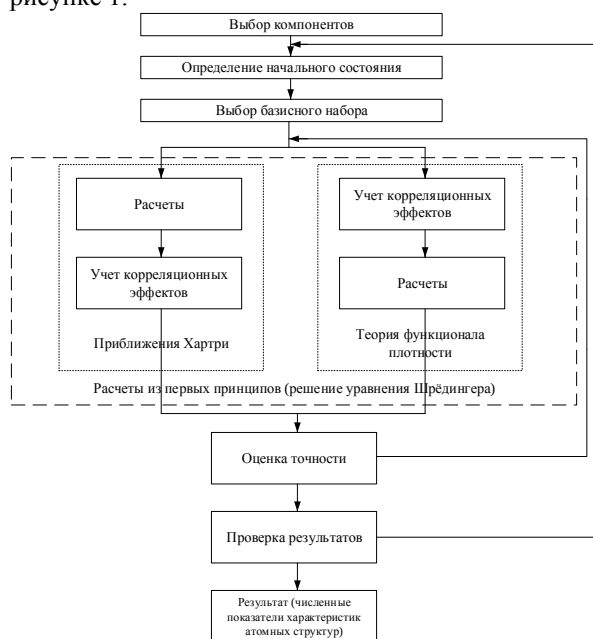


Рисунок 1 - Обобщенная схема алгоритма расчета свойств материалов

Алгоритм для неограниченного метода Хартри-Фока

На рисунке 2 представлен упрощенный алгоритм расчета для неограниченного метода Хартри-Фока. Алгоритм представляет собой более глубокий вариант ветки из рисунка 1 для метода Хартри-Фока. Данный алгоритм разрабатывался с применением модульного принципа. В него могут быть подставлены разные базисы и методы (из модификаций Хартри-Фока) без изменений общего кода. Место для подстановки базиса выделено пунктиром. В циклах расчета кинетической, потенциальной энергии, а также матрицы перекрывания расчеты конкретных элементов вынесены ввиду их индивидуальности для каждого базиса. Под гамильтонианом в алгоритме понимается матрица с суммой кинетической и потенциальной энергии для каждого элемента. Расчет общей энергии до перехода в основной цикл производится с целью получения начального значения, с которым уже будет сравниваться следующее, полученное на первой же итерации.

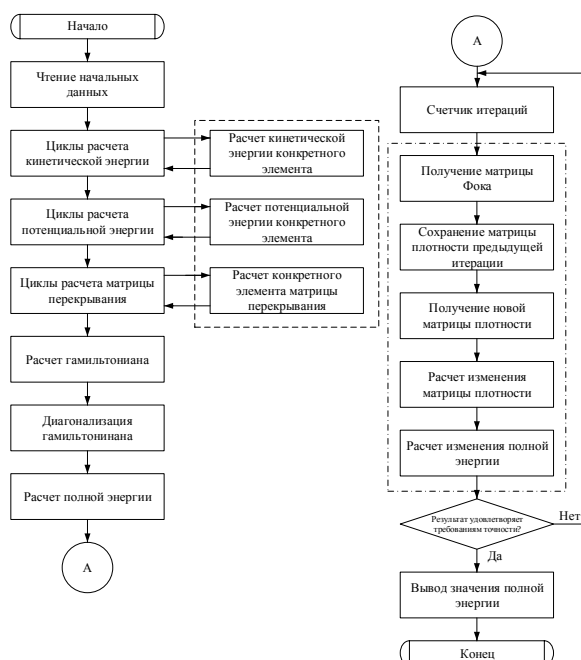


Рисунок 2 - Алгоритм расчета для неограниченного метода Хартри-Фока

Алгоритм работы программы

С точки зрения пользователя программа моделирования свойств атомных структур с применением теории функционала плотности может быть представлена, как показано на рисунке 3.

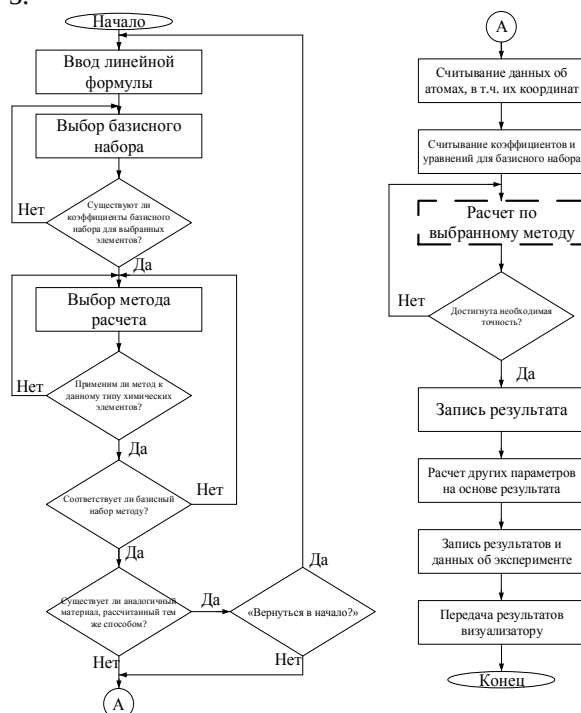


Рисунок 3 - Алгоритм работы программы

Первые шаги алгоритма – ввод линейной формулы, выбор метода расчета и базисного набора происходят в самой оболочке. Необходимо, чтобы выполнение этой задачи у исследователя занимало как можно меньше времени, поскольку

на сегодняшний день для того, чтобы задать те или иные параметры в большинстве существующих программных пакетов, необходимо воспользоваться текстовым редактором и вводить параметры не в формуляр, а в виде текста. Этот фактор в совокупности с большим количеством входных параметров создает высокий порог вхождения для специалистов и зачастую открывает не все возможности. Необходимо, чтобы условия проверялись в автоматическом режиме путем внесения соответствий и рекомендаций (базис – метод, базис – тип материала, метод – тип материала) в алгоритм функционирования программы.

Основной расчет выделен пунктирной линией. Подавляющее большинство существующих методов расчета итерационные и в итоге каждой итерации проверяется условие достижения точности. Эта особенность объединяет и метод Хартри-Фока и ТФП, включая все их модификации.

Результат представляет из себя массив чисел, которые необходимо интерпретировать. Интерпретаторы могут визуально показать расположение и форму орбиталей, распределение энергии, вид кристаллической решетки и многое другое. Так же интерпретатор может рассчитать по полученному массиву электронной плотности энергию связи и другие свойства атомных структур.

Заключение

К настоящему времени были изучены существующие программные продукты по моделированию материалов. Руководствуясь их достоинствами и недостатками, был разработан алгоритм и общая концепция программного комплекса.

Алгоритм включает в себя проверку соответствия вводимых исходных данных для моделирования и возможность проведения серии расчётов в автоматическом режиме.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.

Список использованных источников

1. Кларк Т. Компьютерная химия / Т. Кларк. – Москва: «Мир», 1990 – 371 с.
2. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия / В.И. Барановский. – Москва: «Академия», 2008. – 382 с.
3. Сарры А.М., Сарры М.Ф. К теории функционала плотности // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – № 6. – С. 1237-1243.