

**МЕТОДИКА РАСЧЕТА ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ
РЕЗУЛЬТАТОВ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ**

А.Н. Трифонов, А.С. Попов

Научный руководитель: доцент, к.т.н. А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: ant9@tpu.ru

**METHOD OF CALCULATION OF ELECTRICAL PROPERTIES OF MATERIALS BASED
ON THE RESULTS OF QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS**

A.N. Trifonov, A.S. Popov

Scientific Supervisor: Associate Professor, Ph.D. A.V. Obkhodkiy

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: ant9@tpu.ru

***Abstract.** The work is devoted to a literary analysis of methods for interpreting the results of quantum-chemical calculations of the electronic structure. The concept of calculating the density of electronic states on the basis of the results obtained by the Hartree-Fock method is given. The structural scheme of the software based on the constructed concept is presented.*

Введение. В связи с постоянным развитием вычислительных машин, интерес к моделированию начинает возникать во многих областях. Преимущества проведения расчетных экспериментов перед натурными позволяют значительно сэкономить на количестве экспериментов путем определения направления исследований. В контексте химии моделирование уже очень долгое время привлекает интерес своей гибкостью и точностью, которую может дать инструменты квантовой химии [1]. Однако исследователей данной отрасли привлекают, в основном, свойства, характерные для микроскопических соединений. В то время как математический аппарат квантовой химии давно справляется с расчетом кристаллических структур, расчету свойств, присущих кристаллам, уделено довольно малое количество исследований, и еще меньше программных продуктов с узким перечнем предлагаемых свойств. Возможность получения свойств, характерных для материалов, обладающих кристаллической решеткой, расширит сферу использования квантовой химии, при помощи которой можно рассчитывать любые материалы с высокой точностью, ограничиваясь лишь вычислительными ресурсами [2].

Моделирование материалов на основе квантовой химии делится на три основных этапа: формирование входных данных, квантово-химический расчет и интерпретация результатов. Под интерпретацией понимается перевод массивов данных результатов квантово-химических расчетов в понятные графики, рисунки и числа. Предполагается, что расширение свойств, доступных для расчета, привлечет внимание многих исследователей, для которых эти свойства актуальны.

Методы исследования. Плотность состояний (англ. density of the states, DOS) – важное понятие физики твердого тела, которое представляет собой количество состояний в единичном энергетическом

интервале. График DOS может использоваться как ценный инструмент для анализа природы электронной структуры [3-4].

Основным назначением разрабатываемой программы является расчет плотности состояний с возможностью внесения модификаций в рамках заданной математической модели и графическая интерпретация полученных в ходе данного расчета результатов.

Входные данные программы являются орбитальные энергии, числа заполнения и количество орбиталей исследуемого соединения. Эти данные об исследуемой молекуле получены в ходе предварительных квантово-химических расчетов по методу Хартри-Фока с использованием уравнений Рутана в приближении МО ЛКАО, производимых с помощью программного комплекса моделирования материалов [5].

Программное обеспечение включает в себя набор программ-модулей, каждый из которых выполняет свои определенные функции. Условно всю программу можно разделить по функциональному признаку на четыре части: взаимодействие с базой данных, настройка, расчет, формирование результата и модуль формирования отчетов об ошибках, который интегрирован в работу каждой части, проверяя правильность выполнения программы на всех этапах.

Рассмотрим структурную схему программы, представленную на рисунке 1. Весь процесс работы программы представлен последовательным набором действий, каждое из которых по функциональному признаку формирует определенный программный модуль. Программные модули взаимодействуют последовательно друг с другом, составляя полный цикл работы программы, который условно можно разделить на этапы:

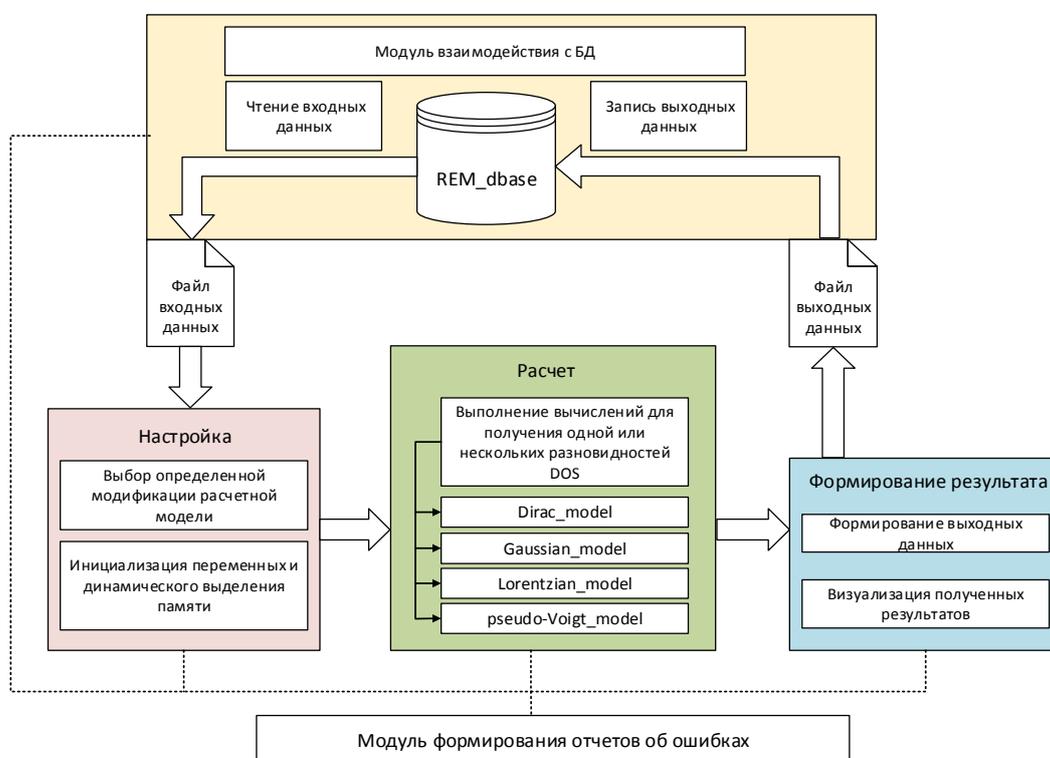


Рис. 1. Структурная схема программного обеспечения

Алгоритм программы начинается с настройки взаимодействия с базой данных REM_dbase, в которой хранятся результаты предварительных квантово-химических расчетов. Далее пользователю необходимо выбрать определенную модификацию математической модели, которая будет использоваться для получения соответствующей разновидности плотности состояний. Стоит отметить, что для более детального анализа исследуемого соединения, может быть выбрано одновременно несколько вариантов расчетной модели. После этого производится инициализация всех необходимых переменных и массивов с динамическим выделением памяти.

Первым шагом в расчетах математической модели является формирование массивов промежуточных данных, которые затем используются при расчете плотности состояний. Следующим шагом является непосредственно вычисление плотности состояний исследуемого образца с применением методов Дирака, Гаусса, Лоренца и др. (в зависимости от выбора модификации математического аппарата расчетов). Полученные массивы значений плотности состояний, вместе с сформированными значениями орбитальной энергии (которые образуют ось абсцисс график DOS), поступают на вход программного модуля, выполняющего функции графической интерпретации произведенных расчетов. Завершающим этапом программы является формирование выходного файла программы и его запись в БД REM_dbase.

Заключение. В настоящей работе осуществлялся литературный обзор математического аппарата для получения зонной структуры и плотности состояний исследуемого соединения, исходя из предварительных квантово-химических расчетов, выполняемых по методу Хартри–Фока–Рутана. Разработана методика формирования и графической отображения плотности состояний. Составлен алгоритм функционирования и структура программного модуля для интерпретации квантово-химических расчетов, сформированы требования к входным и выходным файлам.

Исследования проводились при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение RFMEFI57816X0198.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Барановский В.И. Квантовая механика и квантовая химия. – Москва: «Академия», 2008. – 382 с.
2. Кларк Т. Компьютерная химия. – Москва: «Мир», 1990 – 371 с.
3. Kuruvilla, T.K., Prasana, J.C., Muthu, S., George, J. & Mathew, S.A. Quantum mechanical and spectroscopic (FT-IR, FT-Raman) study, NBO analysis, HOMO-LUMO, first order hyperpolarizability and molecular docking study of methyl[(3R)-3-(2-methylphenoxy)-3-phenylpropyl]amine by density functional method // Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2018. – Vol. 188. – pp. 382-393.
4. Vennila, P., Govindaraju, M., Venkatesh, G., Kamal, C., Mary, Y.S., Panicker, C.Y., Kaya, S., Armaković, S. & Armaković, S.J. A complete computational and spectroscopic study of 2-bromo-1, 4-dichlorobenzene – A frequently used benzene derivative // Journal of Molecular Structure. – 2018. – Vol. 1151. – pp. 245-255.
5. Timothy J. Giese. Density functional theory. – Department of Chemistry, Minnesota 55455, USA: University of Minnesota Minneapolis, 2008 – 26 с.