

И. С. Луценко*, П. В. Захаров, А. М. Еремин, А. И. Чередниченко

Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им.

В. М. Шукшина, г. Бийск

**Lucenko.Iwan@yandex.ru*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ КЛАСТЕРА ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В КРИСТАЛЛЕ PT_3AL

В данной работе показана методика моделирования в системе *ABINIT*. Для верного понимания описана суть первопринципных расчетов, приведены примеры программ для их реализации. Отдельно раскрыт программный продукт *ABINIT*, его основные возможности и способы работы. Показан процесс моделирования в данной системе и его основные этапы. После чего приведен пример моделирования с последующей визуализацией.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод функционала плотности, дискретный бризер, нелинейная динамика, локализованная мода.

I. S. Lutsenko, P. V. Zaharov, A. M. Eremin, A. I. Cherednichenko

AB INITIO SIMULATION OF CLUSTER DISCRETE BREATHERS IN A CRYSTAL PT_3AL

In this paper, the technique of modeling *ABINIT* system. For a proper understanding of the essence of first-principle calculations described, are examples of programs for their implementation. Separately disclosed software *ABINIT*, its basic features and ways of working. It shows the process of modeling in this system, and its main stages. After that, an example followed by visualizing simulation.

Keywords: computer simulation, density functional method, discrete breathers, nonlinear dynamics, localized mode.

Компьютерное моделирование в настоящее время занимает важное место в физике конденсированного состояния вещества. Особенно в тех ее областях, где натуральный эксперимент крайне сложен при проведении или не возможен в силу разных обстоятельств. Одним из таких направлений является изучение процессов локализации энергии на атомном уровне без топологических нарушений атомной структуры.

Для моделирования процессов, происходящих на молекулярном уровне, необходимо, как и для любой другой модели, выбрать важные

свойства и параметры и отбросить остальные. Для изучения процессов на атомном уровне это означает верно выбрать методы описания взаимодействия частиц. На данный момент описать поведение системы частиц можно при помощи методов молекулярной механики, полуэмпирических методов и неэмпирических методов. Все эти методы имеют различную точность и скорость вычислений, так наиболее близкими к реальности являются неэмпирические методы, но расчеты с их использованием требуют больших вычислительных мощностей и многих часов компьютерного времени. В зарубежной литературе данные методы называют *ab initio*, дословно – «из первых принципов»; и основываются они на решении уравнения Шредингера [1]. В принципе в данных методах должны учитываться и электроны, и ядра, но как правило, используется приближение Борна – Оппенгеймера, в котором не учитывается движение ядер полагается, что электроны движутся в потенциале, создаваемом системой неподвижных ядер, а ядерное движение исследуется уже исходя из опыта. Таким образом, первопринципные методы расчета, в отличие от методов молекулярной механики и полуэмпирических методов, позволяют учесть такие параметры, как кулоновское взаимодействие электронов с ядрами и между собой, электростатическое взаимодействие ядер, а также в случае необходимости, и нерелятивистские эффекты [1, 2].

В настоящее время реализовать расчеты из первых принципов позволяют многие программные продукты: *Gaussian*, *CPMD*, *ABINIT*, *VASP*, *CRYSTAL* и другие. Для нас наибольший интерес представляет программный продукт *ABINIT*. Данное программное обеспечение (ПО) распространяется по свободной лицензии и разработано, прежде всего, для операционных систем семейства *Unix*. Для установки *ABINIT* необходимо произвести конфигурацию, указав необходимые библиотеки и параметры сборки. К данным библиотекам относятся как математические, для расчетов, так и библиотеки для работы аппаратного обеспечения. В ПО предусмотрена поддержка многопроцессорных и многоядерных систем, параллелизм в *ABINIT* достигается благодаря использованию технологий *OpenMP*, *MPI* и *CUDA*. *ABINIT* позволяет вычислить полную энергию системы, плотность заряда и электронную структуру в рамках теории функционала плотности. Для работы используются входной скрипт и псевдопотенциалы, определяющие взаимодействие элементов. Важен также и тот факт, что в *ABINIT* встроена поддержка периодических граничных условий, которая крайне важна, т. к., зачастую приходится моделировать системы всего из нескольких десятков атомов [2].

Процесс моделирования в *ABINIT* проходит в несколько этапов, которые выделены исключительно в целях удобства и носят смысловой, не формализованный характер. Изначально необходимо верно оценить возможности техники, это чрезвычайно важно, т. к. являясь программой для первопринципных расчетов, *ABINIT* требует огромных ресурсов для

расчета больших систем. После оценки технических ресурсов следует описать систему соответствующих размеров. К описываемым параметрам относят: размер области моделирования, описание типов атомов, положение и тип каждого атома системы, ряд параметров, связанных с энергией, алгоритмы, которые будут использованы в процессе моделирования, и т. д. Следующим шагом будет запуск полученного скрипта с целью уточнения параметров на основе результатов первопринципных расчетов, также внесение необходимых изменений. После чего следует собственно моделирование процесса. В зависимости от конкретного случая результаты моделирования можно изучить как чисто численно, по выходным файлам, так и переработав их в какое-либо визуальное представление. Имеется ряд успешных работ [3; 4], где исследовалась возможность существования дискретных бризеров в соединениях углерода из первых принципов.

В нашем случае целью моделирования была проверка существования дискретных бризеров (ДБ) в кристалле Pt_3Al , полученных нами в результате полуэмпирических расчетов. Для этого, исходя из возможностей ЭВМ, нами была описана система из 24 атомов – 8 атомов алюминия и 16 – платины. Для запуска ДБ было произведено смещение двух атомов алюминия в направлении друг к другу на расстояние 0,6 Å каждый. Поскольку *ABINIT* в симуляциях использует периодические граничные условия, данное смещение атомов описывает замкнутый ДБ, или кластер бризеров. После чего включена динамика, и запущен расчет, временной шаг задан в 0,0012 пикосекунды. Для верного восприятия полученной информации нами была проведена визуализация: при помощи программы *Cut3D*, устанавливаемой в комплекте с *ABINIT*, мы получили файл структуры с расширением *xsf*, специализированный для программного продукта *XCrySDen* (рис. 1.).

Для наблюдения за поведением отклоненных атомов, был построен график координаты от времени. При помощи стандартных *Linux* процедур мы сделали выборку координат, которую в дальнейшем переработали при помощи программного продукта *Gnuplot* (рис. 2.).

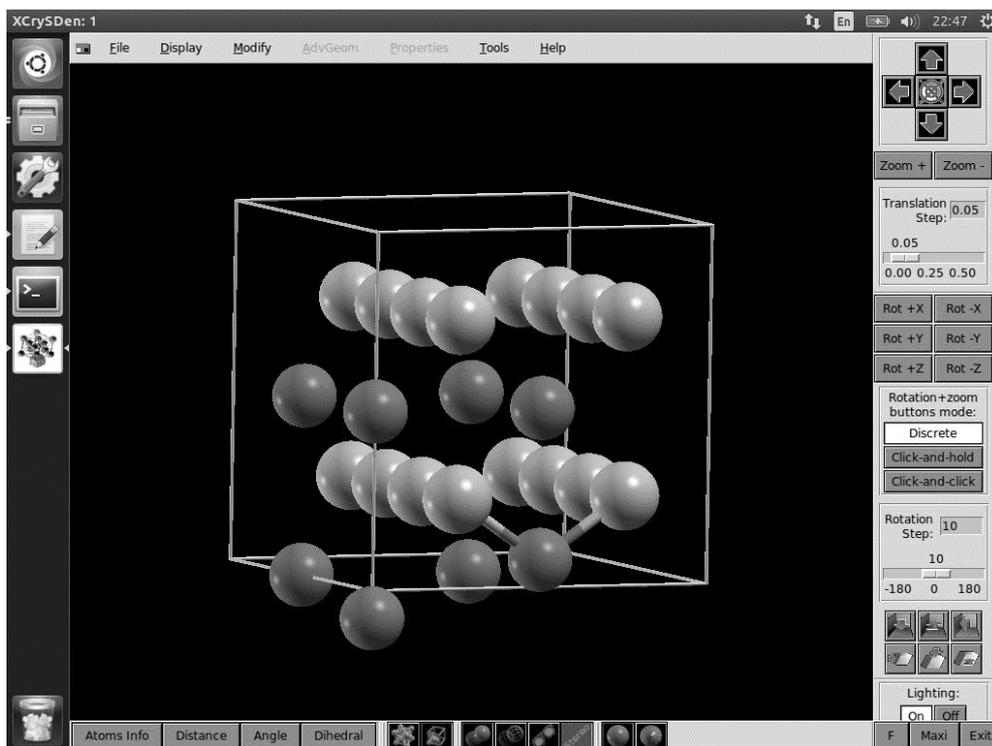


Рис. 1. Элементарная структура из файла xsf, визуализированная *XCrysDen*

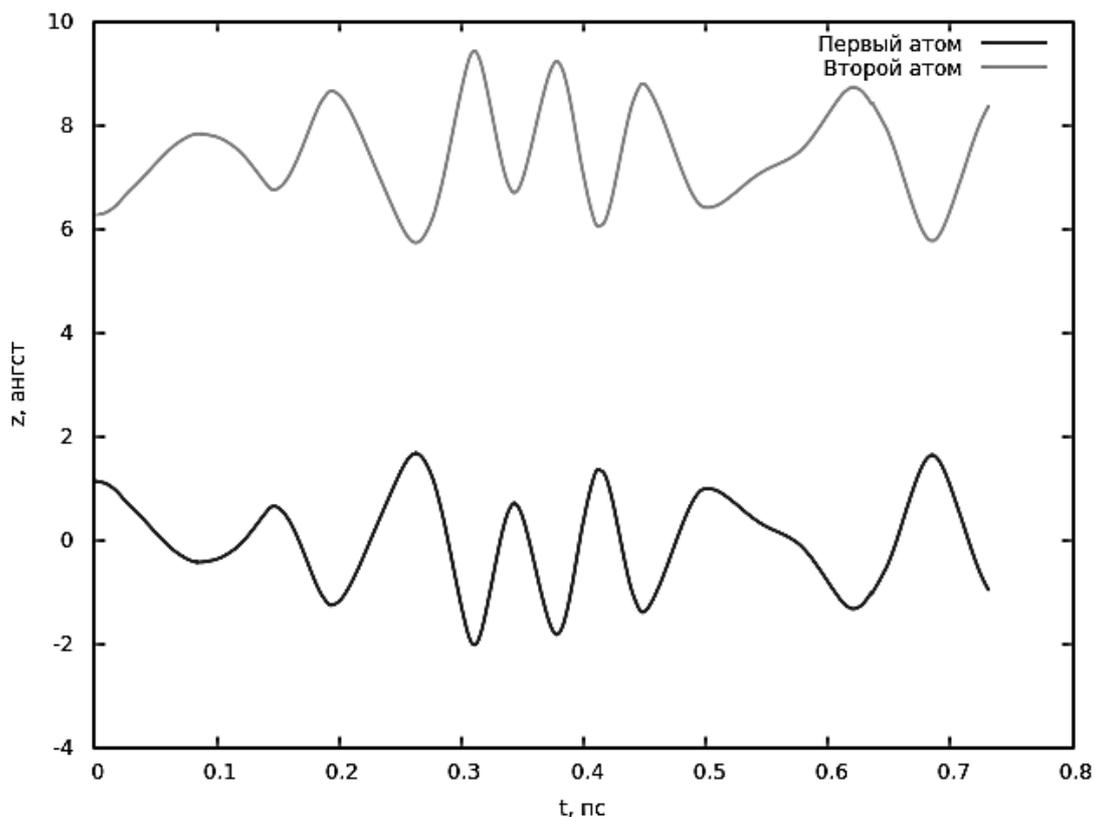


Рис. 2. График зависимости координат атомов от времени.

Была произведена серия расчетов, объем накопленных данных не позволяет судить о типе нелинейности ДБ. Однако результаты свидетельствуют, что происходит локализация переданной энергии на

атомах алюминия. Таким образом, предварительные расчеты показали возможность локализации энергии на атомах легкой подрешетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, в рамках проекта № 16-42-220002 р_а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kohn W. Nobel Lecture // Rev. Mod. Phys. 1999. V. 71 P. 1253.
2. ABINIT [Офиц. сайт]. URL: <http://www.abinit.org/> (дата обращения: 03.10.2016).
3. Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations / Chechin G.M. [et. al.] // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. P. 0454326.
4. Chechin G. M., Lobzenko I. P. Ab initio refining of quasibreathers in graphane // Letters on materials. 2014. V. 4(4). P. 226-229.