

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В СИСТЕМЕ ABINIT

Луценко И.С., Захаров П.В., Ерёмин А.М., Чередниченко А.И.

*Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им.
В.М. Шукина, Бийск, zakharovpvl@rambler.ru, eam77@yandex.ru*

В данной работе показана методика моделирования в системе ABINIT. Для верного понимания описана суть первопринципных расчётов, 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 приведён пример моделирования с последующей визуализацией.

Компьютерное моделирование в настоящее время занимает важное место в физике конденсированного состояния вещества. Особенно в тех её областях, где натурный 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 расчёты 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 и полагается, что электроны движутся в потенциале, создаваемом системой неподвижных ядер, а ядерное движение исследуется уже исходя из опыта. Таким образом, первопринципные методы расчёта, 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 расчёты 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 расчётов, так и библиотеки для работы аппаратного обеспечения. В ПО предусмотрена поддержка многопроцессорных и многоядерных систем, параллелизм в ABINIT достигается использованием таких технологий как 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 расчётов, ABINIT требует огромных ресурсов для расчёта 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, уже на основе результатов первопринципных расчётов, и соответственно 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 было проверить существование дискретных бризеров (ДБ) в кристалле Pt_3Al , полученных нами в полуэмпирических расчётах. 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 одного атома алюминия в направлении ближайшего к нему другого атома алюминия, на расстояние 0,6 Å. После чего включена динамика, и запущен расчёт, 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.).

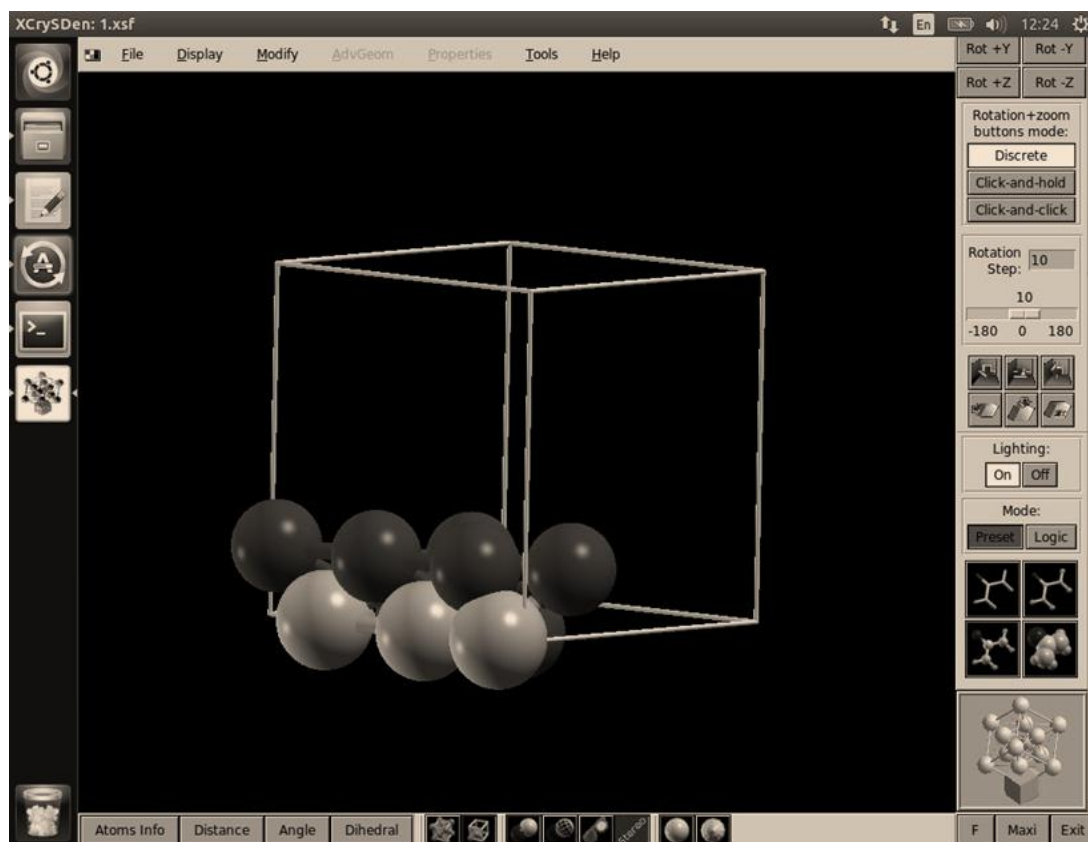


Рис. 1. Элементарная структура из файла xsf, визуализированная XCrysDen.

Был произведен расчет пяти периодов колебаний атома алюминия, полученные 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 p_a.

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. Chechin G.M., Dmitriev S.V., Lobzenko I.P., Ryabov D.S. Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations // 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.