

## Розробка графічної оболонки для програми розрахунків фізичних характеристик твердих тіл

Владислав Сергійович Кузнецов,  
Наталя Володимирівна Моїсеєнко<sup>[0000-0002-3559-6081]</sup>

Криворізький державний педагогічний університет,  
пр. Гагаріна, 54, м. Кривий Ріг, 50086, Україна  
{ayron1705, n.v.moiseenko}@gmail.com

**Анотація.** *Метою* даного дослідження є розробка графічної оболонки для програми розрахунків фізичних характеристик твердих тіл. *Задачі* дослідження: проаналізувати програмне забезпечення для розрахунків фізичних характеристик твердих тіл, що існує; розробити алгоритм роботи та його програмну реалізацію графічної оболонки для програми розрахунків фізичних характеристик твердих тіл. *Об'єкт* дослідження: програми розрахунків фізичних характеристик твердих тіл. *Предмет* дослідження: графічна оболонка для програми розрахунків фізичних характеристик твердих тіл. *Результатом* роботи є розроблена графічна оболонка для програми розрахунків фізичних характеристик твердих тіл.

**Ключові слова:** тверде тіло, фізичні характеристики, програма для розрахунків, графічна оболонка.

## Development graphic shell for the program calculations of physical properties of solids

Vladyslav S. Kuznietsov and Natalia V. Moiseienko<sup>[0000-0002-3559-6081]</sup>

Kryvyi Rih State Pedagogical University, 54, Gagarin Ave., Kryvyi Rih, 50086, Ukraine  
{ayron1705, n.v.moiseenko}@gmail.com

**Abstract.** *The purpose* of this study is development of graphic shell for the program calculations of physical properties of solids. *Objectives of study:* to analyze software for the calculations of physical properties of solids, that exists; to work out the algorithm and programmatic realization of graphic shell for the program of calculations of physical properties of solids. *The object of research* are programs of calculations of physical properties of solids. *The subject of research:* graphic shell for the program of calculations of physical properties of

solids. *Results of the study* is developed graphic shell for the program of calculations of physical properties of solids.

**Keywords:** solid state, physical properties, the program for calculations, graphic shell.

Пошуки методів мінімізації електронних схем призвели до відкриття низки надзвичайних фізичних явищ, які показали, що індивідуальні молекули можуть виступати у ролі провідників, діодів, транзисторів, логічних та запам'ятовуючих пристроїв. Основними перевагами використання молекул у ролі прототипів елементів електронних схем є їх досить малий розмір, що складає всього декілька нанометрів, легкий та дешевий спосіб синтезу молекулярних структур, а також виявлення зовсім нових вольт-амперних характеристик, що не мають аналогів у напівпровідниковій електроніці. Тому поряд з актуальністю практичного застосування як окремих молекул, так і молекулярних комплексів для створення, передачі, прийому і обробки інформації, побудови так званих молекулярних комп'ютерів, проблема дослідження молекулярних наноструктур є самостійною фундаментальною проблемою фізики конденсованого стану, оскільки властивості таких структур істотно відрізняються від класичних напівпровідникових об'єктів.

Обчислення повної енергії та моделювання молекулярної динаміки з використанням теорії функціоналу електронної густини представляють надійний інструмент в фізиці твердого тіла, фізиці матеріалів, хімічній фізиці і фізичній хімії. Множина різних застосунків для систем типу молекул, об'єму матеріалів та поверхонь довели потужність цих методів в аналізі та прогнозуванні рівноважних та нерівноважних властивостей. *Ab initio* моделювання молекулярної динаміки дозволяє аналізувати рух атомів та точно розраховувати такі термодинамічні властивості як вільна енергія, константи дифузії та температура плавлення матеріалів.

Для розрахунків електронної структури матеріалів нині широко застосовуються неемпіричні, так звані *ab initio* методи. За їх допомогою проводяться розрахунки розподілу електронної густини, повної енергії системи, щільності станів, енергетичних і структурних параметрів твердих тіл.

Методи *ab initio* часто використовуються в поєднанні з класичним методом молекулярної динаміки, який протягом тривалого часу використовується в теорії твердого тіла для дослідження атомних конфігурацій і реальної структури речовини. Цей метод дозволяє досліджувати атомні системи з великою кількістю частинок і спостерігати поведінку системи протягом великих часових інтервалів.

У роботі створено графічну оболонку для пакету програм *fhimd*, розробленого для дослідження властивостей великих систем. Пакет програм *fhimd* надає можливість обчислення статичної повної енергії або *ab initio* моделювання молекулярної системи.

Розрахунки базуються на ітеративному методі отримання параметрів основного стану електронів. Псевдопотенціали у формі Клейнмана та Біландера використовуються для опису потенціалу ядер та електронів остову. Обмін та

кореляція описуються в наближенні локальної електронної густини або в різних апроксимаціях «універсального градієнта». Рівняння руху ядер інтегруються за стандартною схемою молекулярної динаміки. Крім того, ефективна оптимізація структури може бути виконана за спрощеною схемою варіаційним методом.

Для введення початкових даних для стартової утіліти fhstart потрібні два вхідних файли. Файл inp.mod містить головним чином керуючі параметри для запуску, наприклад, часовий крок для мінімізації електронних та атомних схем, критерії збіжності, максимальна кількість кроків та ін.

Вигляд файлу вхідних даних inp.mod:

```
-1 100 1000000   : nbeg iprint timequeue
100 2           : nomore nomore_init
6.0 0.2         : delt gamma
4.0 0.2 0.0001 : delt2 gamma2 eps_chg_dlt
400 2           : delt_ion nOrder
0.0 1.0         : pfft_store mesh_accuracy
2 2             : idyn i_edyn
0 .false.       : i_xc t_postc
.F. 0.001 .F. 0.002 : trane ampre tranp amprp
.false. .false. .false. 1800 : tfor tdyn tsdp nstepe
.false.         : tdipol
0.0001 0.0005 0.2 : epsel epsfor epsekinc
0.01 0.001 3     : force_eps(1) force_eps(2) max_no_force
3                : init_basis
```

Файл start.inp описує геометрію суперкомірки та конфігурацію ядер. він також містить інформацію, яка відноситься до молекулярно-динамічного моделювання, оптимізації структури або обчислення основного електронного стану.

Файл start.inp містить всю інформацію про структуру: геометрію суперкомірки та позиції ядер.

Розроблена графічна оболонка є зручним інтерфейсом між програмою розрахунків фізичних характеристик твердих тіл [1; 2] fhimd та користувачем (рис. 1).

Для програмної реалізації графічної оболонки було розроблено систему класів мовою C# в середовищі Microsoft Visual Studio.

Оскільки програма fhimd потребує введення даних шляхом запису їх у текстові файли у визначеному порядку, то головною задачею оболонки є надання зручного способу введення вхідних даних для програми розрахунків характеристик твердих тіл fhimd і автоматичного запису їх в задані файли. Програма має два режими: створення вхідних файлів та редагування вже існуючих.

У процесі введення даних відбувається перевірка на коректність та запобігання введення неактуальних даних. Наприклад, якщо не вибраний режим молекулярної динаміки, то не потрібно вносити дані, які використовуються для цього режиму, як то pros, nseed, nthm, Q та ін. (рис. 2, 3).

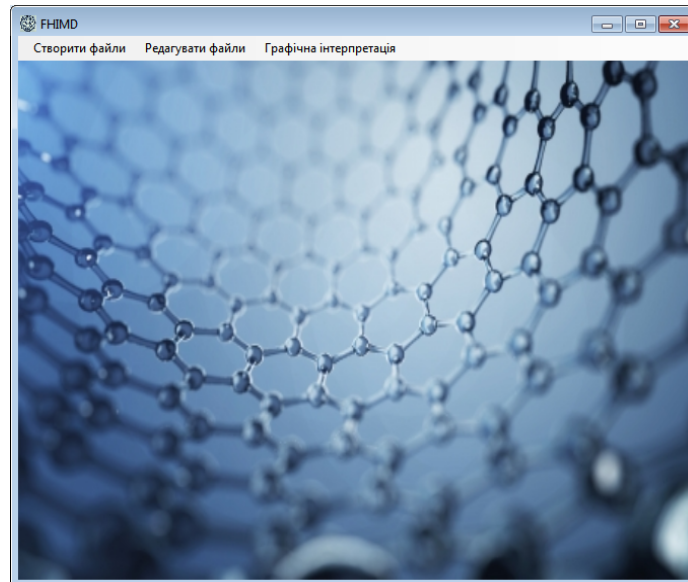


Рис. 1. Головне вікно програми fHIMD

Параметр	Значення	Опис
trane	<input type="radio"/> true <input checked="" type="radio"/> false	збурення початкових хвильових функцій значенням ampre
ampre	0,001	амплітуда довільного збурення додається до хвильової функції
tranp	<input type="radio"/> true <input checked="" type="radio"/> false	чи можна переміщати іони
amprp	0,002	амплітуда довільного збурення додається до іонних позицій
tfor	<input type="radio"/> true <input checked="" type="radio"/> false	якщо встановлено в .true. іонні позиції релаксують
tdyn	<input type="radio"/> true <input checked="" type="radio"/> false	якщо встановлено в .true. виконується МД моделювання
tsdp	<input type="radio"/> true <input checked="" type="radio"/> false	схема оптимізації структури: T-модифік. схема покрокового спуску, F-спрощена схема динаміки
nstep	1800	максимальна кількість електронних ітерацій, для того щоб зійшлися сили
tdipol	<input type="radio"/> true <input checked="" type="radio"/> false	якщо встановлено в .true. обчислюється корекція поверхневого диполю
epsel	0,0001	середня зміна енергії менш ніж epsel для останніх трьох ітерацій
epsfor	0,0005	іонні сили менше ніж epsfor; є активним, тільки якщо tfor та tford - T.
epsekinc	0,2	середня зміна хвильових функцій для останніх трьох ітерацій менш ніж epsekinc
force_eps(1)	0,001	максимально припустима відносна зміна в локальних силах
force_eps(2)	0,001	максимально припустима відносна зміна в глобальних силах перед зміщенням іонів
max_no_force	3	макс. число електронних ітерацій для якого на іонному кроці не обчисл. локальні сили
init_basis	3	тип базису, що використовується в ініціалізації

Зберегти

Рис. 2. Форма для створення вхідного файлу inp.mod

start.inp

Загальні | Параметри | Атоми

npres  кількість процесорів (PE)

minpres  мінімальне число PE

ngprx  число PE в групі

nsp  кількість сортів атомів

nel\_exc  кількість надлишкових електронів

n\_empty  кількість незанихтих станів

ibrav 0 тип комірки 0-замовч 1 проста куб., 2 гранецентр. 3 об'ємноцентр 8 ромб

pginde  індекс точкової групи: 0-центр та симетрії, 1-немає симетрії

celldm     параметри решітки суперкомірки; celldm(1) константа решітки (бор)

nkpt  кількість k-точок

xk(1..3)    координати k-точок

wkpt  вага k-точок

i\_facs(1..3)    фактор згортки k-точки: 1 1 1 відповідає відсутності згортки

t\_kpoint\_rel  true  false true - вектори зворотної решітки, false - Декартові координати

Зберегти

Рис. 3. Форма для створення вхідного файлу start.inp

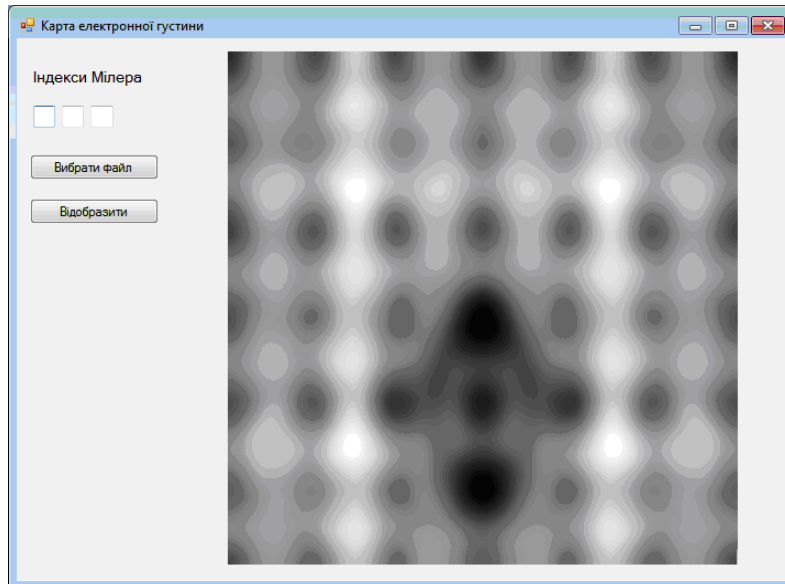


Рис. 4. Форма для графічного відображення карти електронної густини

Після натиснення кнопки «Зберегти» відкривається діалогове вікно, в якому можна вибрати папку та ім'я для зберігання файлу.

У режимі редагування відкривається діалогове вікно для вибору файлу, який треба відкрити, та дані завантажуються в відповідні форми.

Також оболонка містить інструмент для побудови та перегляду карт електронної густини. Оскільки електронна густина обчислюється для багатьох точок і зберігається в окремому файлі, необхідно мати можливість продивлятися карти електронної густини як переріз в заданій індексами Міллера площині (рис. 4).

Пункт меню «Графічна інтерпретація» надає можливість обрати потрібний файл електронної густини, задати індекси Міллера та побудувати карту електронної густини.

## References

1. Car, R., Parrinello, M.: Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory. *Phys. Rev. Lett.* **55**(22), 2471–2474 (1985). doi:10.1103/PhysRevLett.55.2471
2. Car, R., Parrinello, M.: The unified approach to density functional and molecular dynamics in real space. *Solid State Communications.* **62**(6), 403–405 (1987). doi: 10.1016/0038-1098(87)91043-X