

**Моделирование в области химии и физики твердого тела на основе пакета программ CRYSTAL**

**Басалаев Ю.М.**, д.ф.-м.н., профессор

Кемеровский государственный университет, г. Кемерово, Россия

Российский государственный аграрный университет - МСХА им. К.А. Тимирязева, г. Москва, Россия

**Басалаева О.Г.**, к.филос.н., доцент

Кемеровский государственный медицинский университет, г. Кемерово, Россия

**Аннотация.** В статье рассмотрены особенности и сферы применения вычислительного инструмента для компьютерного моделирования в области химии и физики твердого тела пакета программ CRYSTAL. Этот пакет программ может использоваться для проведения последовательных исследований физических и химических свойств кристаллических твердых тел, поверхностей, полимеров, нанотрубок (одностенных и многостенных) и молекул.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, пакет программ CRYSTAL, MPPcrystal, физика твердого тела.

Применение моделей для различных областей научного познания позволяет выявить специфические особенности той области, к которой это средство применяется [6, с.55].

Различные мыслительные модели связаны с теоретическим изучением определенных реальностей [7, с.216].

Компьютерное моделирование представляет собой один из видов теоретического изучения физической реальности. В компьютерной модели формируется новое знание, фактически ничем не уступающее знанию, добываемому в эксперименте.

К программам общего назначения для моделирования кристаллических тел относится код CRYSTAL [9]. Он позволяет проводить последовательные исследования физических и химических свойств кристаллических твердых тел (3D), поверхностей (2D), полимеров (1D) и молекулы (0D).

Пакет CRYSTAL был разработан Чезаре Пизани, Карлой Роэтти и Роберто Довези (группа теоретической химии Туринского университета) как химический подход к твердому состоянию в 1977 году. В 1981 году Вик Сондерс присоединился к команде и дал мощный толчок к созданию первой общей компьютерной программы *abinitio* LCAO (линейная комбинация атомных орбиталей) для периодических систем, эффективной в вычислительном отношении и численно точной.

Первоначальная программа Хартри-Фока (HF) для твердых тел была расширена до DFT (теории функционала плотности) и множества свойств, которые теперь можно вычислить. Внедрение большинства новых функций стало возможным также благодаря ряду аспирантов и докторантов, а также постдоков, которые на протяжении многих лет посвятили часть своей жизни разработке этого проекта.

Программа CRYSTAL состоит из двух модулей: (1) *crystal* и (2) *properties*. Модуль *crystal* предназначен для выполнения расчетов

[SCF](#)

, оптимизации геометрии и частотных вычислений для структур, указанных во входных данных. В конце процесса SCF программный кристалл записывает информацию о кристаллической системе и ее волновой функции в виде неформатированных последовательных данных в блоке 9

[Fortran](#)

и в виде форматированных данных в блоке 98 Fortran. Одноэлектронные свойства и анализ волновой функции могут быть вычислены на основе волновой функции SCF, запустив модуль *properties*

Основное преимущество программы CRYSTAL связано с глубоким и оптимизированным использованием симметрии на всех уровнях вычислений (SCF, а также вычисления градиентов и частот колебаний). Это позволяет значительно снизить вычислительные затраты на периодические вычисления.

На сегодняшний день, CRYSTAL с его расширением massiveparallel (MPP) является одним из немногих программных продуктов, способных выполнять передовые исследовательские проекты по архитектурам HPC. MPPcrystal был разработан для эффективной работы на тысячах процессоров. Он может обрабатывать очень большие системы элементарных ячеек с большими требованиями к памяти, поскольку матрицы во взаимном пространстве полностью распределены по процессорам.

Преимущества MPPcrystal: (1) диагонализация матрицы хорошо сбалансирована, поскольку в диагонализации одной матрицы задействовано много процессоров; (2) требования к памяти на процессор уменьшаются с увеличением количества процессоров, поскольку данные распределяются по процессорам.

Ввод-вывод ограничен чтением пользовательской панели ввода и записью выходных файлов с результатами задания. Такие функции делают его особенно подходящим для запуска на высокопроизводительных суперкомпьютерах.

Высокая производительность MPPcrystal позволяет исследователям успешно конкурировать за доступ к мощным суперкомпьютерным ресурсам в рамках международных проектов.

CRYSLOT - это современный и гибкий онлайн-инструмент, который делает CRYSTAL более удобным для пользователя. Он позволяет модифицировать и настраивать графики в соответствии со стандартами, требуемыми для научной графики. Он предназначен для отображения свойств кристаллических тел, вычисленных с помощью CRYSTAL кода, и, в частности, можно отображать зонную структуру и плотность состояний.

К сферам применения пакета CRYSTAL относятся все традиционные области применения теоретической химии: двухатомные молекулы, малоатомные молекулы, межмолекулярные комплексы, химические реакции в газовой фазе и в конденсированных средах.

Также, CRYSTAL активно используется исследователями для неэмпирических расчетов идеальных кристаллов. Например, в рамках теории функционала плотности «с использованием приближения B3LYP для кристаллов Be M N

<sup>2</sup>  
( M = C, Si, Ge, Sn) с решеткой халькопирита выполнены модельные расчеты электронной структуры, получены равновесные параметры кристаллической решетки, вычислены зонные спектры, плотности состояний и плотности распределения заряда»

Автор: Басалаев Ю.М., Басалаева О.Г.  
23.03.2024 22:33 - Обновлено 23.03.2024 22:35

---

[5, с.140-146.]. Также, на основе программы CRYSTAL:

произведено моделирование с использованием метода подрешеток [1, с. 15-20]; [4, с.68-72]

; изучены новые алмазоподобные соединения со структурой антихалькопирита [2, с.121-122.]; изучена электронная структура гипотетических кристаллов IV-IV-IV<sub>2</sub> с решеткой халькопирита [3, с.93-94.].

Также, на основе теории функционала плотности «методом псевдопотенциала в базисе локализованных орбиталей вычислены самосогласованные зонные спектры кристаллов и заряженных подрешеток оксидов и сульфидов щелочно-земельных металлов. Рассмотрены различные совместимые с электронейтральностью кристалла зарядовые состояния подрешеток включая крайние: нейтральные подрешетки, пустая металлическая и двукратно заряженная анионная» [8, с.826-829.].

Кроме того, программы CRYSTAL позволяет рассчитывать распределения электронной и спиновой плотностей, электронный и фононный спектры, поверхность Ферми и рентгеновские структурные амплитуды.

## Литература

1. Басалаев, Ю. М. Влияние подрешеток на формирование зонной структуры кристаллов с решеткой халькопирита: B<sub>2</sub>CN, BC<sub>2</sub>N, BCN<sub>2</sub> / Ю. М. Басалаев // Журнал структурной химии. – 2016. – Т. 57, № 1. – С. 15-20.

2. Басалаев, Ю. М. Новые алмазоподобные соединения со структурой антихалькопирита / Ю. М. Басалаев // Известия вузов. Физика. – 2014. – Т. 57, № 4. – С. 121-122.

3. Басалаев, Ю. М. Электронная структура гипотетических кристаллов IV-IV-IV<sub>2</sub> с решеткой халькопирита / Ю. М. Басалаев, А. С. Поплавной // Известия вузов. Физика. – 2009. – Т. 52, № 9. – С. 93-94.

4. Басалаев, Ю. М. Электронная структура тройных фосфидов MgSiP<sub>2</sub>, ZnSiP<sub>2</sub>, CdSiP<sub>2</sub> / Ю. М. Басалаев, А. Б. Гордиенко, А. С. Поплавной // Известия вузов. Физика. – 2005. – Т. 48, № 1. – С. 68-72.

5. Басалаев, Ю. М. Энергетическая зонная структура кристаллов Be-(C, Si, Ge, Sn)-N<sub>2</sub> / Ю. М. Басалаев, Н. И. Гордиенок // Известия вузов. Физика. – 2017. – Т. 60, № 5. – С. 140-146.

6. Басалаева, О. Г. Социально-философские аспекты взаимосвязи информационной и культурной картин мира: специальность 09.00.11 «Социальная философия»: дисс. на соискание ученой степени кандидата философских наук / О. Г. Басалаева. – Кемерово, 2012. – 199 с.

7. Басалаева, О. Г. Функция понимания в частнонаучной картине мира / О. Г. Басалаева // Вестник Кемеровского государственного университета культуры и искусств. – 2012. – № 18. – С. 215-221.

8. Генезис энергетических зон из подрешеточных состояний в оксидах и сульфидах щелочно-земельных металлов / Ю. М. Басалаев, Ю. Н. Журавлев, А. В. Кособуцкий, А. С. Поплавной // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, № 5. – С. 826-829.

9. CRYSTAL17 User's Manual. [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.crystal.unito.it/index.php> (дата обращения)

Автор: Басалаев Ю.М., Басалаева О.Г.

23.03.2024 22:33 - Обновлено 23.03.2024 22:35

---

17.03.2024)