

УДК 004.457

РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ АНАЛИЗАТОРА СТРУКТУРЫ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН
ДЛЯ ПАКЕТА КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ OpenMX

Баглов А.В.^{1,2}, Хорошко Л.С.^{1,2}

¹Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, baglov@bsu.by

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
Минск, Республика Беларусь

Аннотация: обсуждаются коммерческие пакеты для анализа и обработки данных, получаемых в программах для квантово-механического моделирования материалов. Показано, что идеальным дополнением к пакету OpenMX является программа-анализатор для обработки результатов расчетов строения зонной структуры материалов. Обсуждаются практические задачи анализа расчетов зонной структуры материалов и функциональность такой программы, а также формулируются требования к ее реализации. Продемонстрирована функциональность текущей версии разрабатываемой авторами программы-анализатора на примере тестового файла.

Ключевые слова: электронная структура, дисперсия зоны, анализ, обработка, программирование, C++, OpenMX.

I. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в физике конденсированного состояния и наноматериаловедении активно используется численное моделирование как эффективный подход для исследования широкого спектра свойств различных материалов. Получаемые в таких численных экспериментах результаты в значительной степени расширяют и дополняют традиционные экспериментальные исследования. В случаях, когда проведение экспериментальных исследований серьезно затруднено, численные эксперименты являются предпочтительным методом исследования, (например, фазовая диаграмма состояния вещества в области экстремальных давлений, зонная структура соединений дорогостоящих и редких химических элементов и т.д.). Исследования зонной структуры материалов проводят с использованием специализированных пакетов для численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов, наиболее известными из которых являются Quantum ESPRESSO, VASP, CASTEP [1–3]. Как правило, взаимодействие со всеми программами в таких пакетах осуществляется через CLI (Command Line Interface – интерфейс командной строки). С целью упрощения планирования, проведения и анализа результатов численного эксперимента, в т.ч. «на лету», существуют пакеты, включающие привычный большинству GUI (Graphical User Interface – графический пользовательский интерфейс), например, продвинутые коммерческие пакеты SCM [4], QuantumATK [5], Medea [6]. Такой подход не является принципиально отличным, т.к. фактически GUI является лишь фронтендом, автоматизирующим подготовку входных файлов для CLI-бэкенда, реализующего непосредственно численное моделирование с последующим анализом выходных результатов, организуемых в удобном для исследователя виде. К сожалению, для менее популярных и полукommerческих пакетов вспомогательное программное обеспечение (ПО) развито относительно слабо, либо отсутствует совсем. Авторы данной работы, как и многие исследовательские группы по всему миру, применяют для численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов пакет OpenMX, использующий теорию функционала плотности, теорию псевдопотенциала и базис численных атомно-центрированных орбиталей [7–12], бесплатно распространяемый под лицензией GPLv3.

Одним из важнейших аспектов исследования электронного строения материалов, особенно пониженной размерности, является изучение структуры энергетических зон (или зонной структуры) – спектра собственных значений оператора энергии электрона в пространстве волновых векторов в одночастичном приближении вдоль особых точек высокой симметрии зоны Бриллюэна. Особенность проведения такого расчета состоит в том, что большинство пакетов, в т.ч. и OpenMX, получают собственные значения запрошенного числа состояний для каждой k-точки и в таком же виде предоставляют ее пользователю для дальнейшего анализа и визуализации зонной структуры. В составе пакета OpenMX присутствует программа bandgnu13, которая считывает «сырые» данные и приводит их к формату, удобному для графического построения, а также подготавливает скрипт для пакета Gnuplot, позволяя быстро визуализировать полученный результат в операционной системе Linux.

К сожалению, этого недостаточно для полноценного, эффективного и быстрого анализа данных, востребованных в работе исследователя. Таким образом разработка специализированного ПО для проведения анализа «сырых» данных о структуре энергетических зон, и эффективному представлению его результатов в удобном для исследователя формате является актуальной задачей.

II. ОПИСАНИЕ И ТРЕБОВАНИЯ К ФУНКЦИОНАЛЬНОСТИ

Исходя из строения «сырых» данных, получаемых в результате моделирования, можно выделить 2 направления для анализа: подсистема, связанная с геометрией обратной решетки или пространственная подсистема, и подсистема энергетического спектра электронных состояний или электронная подсистема.

Результат анализа пространственной подсистемы должен включать в себя информацию о векторах трансляции обратной решетки и координаты точек высокой симметрии, вдоль которых рассчитываются промежуточные точки. Координаты точек следует представлять как во внутренних координатах (в единицах решетки), так и в обычных декартовых в ортогональном репере. Обычно при расчетах программы используют атомную систему единиц, где единица измерения энергии – Хартри, а длин – Боры, т.е. следует предусмотреть возможность конвертации в привычные большинству и удобные для опубликования электронвольты и ангстремы, соответственно.

Результат анализа электронной подсистемы должен включать в себя информацию о количестве рассчитанных состояний, в том числе занятых и не занятых, энергии Ферми, количестве спиновых каналов, участвующих в расчете. Как известно, в случае металлов некоторое число зон пересекает уровень Ферми. Необходимо получить информацию о числе таких зон и определить их индексы, что необходимо для визуализации поверхности Ферми в специализированном ПО. В случае наличия щели в энергетическом спектре электронов (в случае полупроводников и диэлектриков), необходимо сразу предоставить информацию о ширине этой щели в электронвольтах, так же должны быть получены значения минимума зоны проводимости и максимума валентной зоны. Помимо анализа, программа должна конвертировать «сырые» данные в двухколоночный формат и записывать их в текстовый файл, удобный для последующего импорта и построения графиков силами специализированного ПО, такого как MS Excel, IBM SPSS, Originlab OriginPro и т.д. Основываясь на результатах анализа, исследователь должен иметь возможность сдвигать энергетический спектр на произвольную величину, что необходимо для совмещения максимума (потолка) валентной зоны с нулевым уровнем – часто используемого в научных публикациях варианта визуализации зонной структуры материалов, а также для построения зонных диаграмм гетеропереходов. При построении зонной структуры наиболее часто используется та часть энергетического спектра, которая расположена вблизи уровня Ферми, поэтому более глубоко- и высоколежащие состояния могут быть отброшены, т. обр. исследователь должен иметь возможность выбора индекса зон, которые должны быть конвертированы и записаны в выходной файл. Наконец, следует иметь возможность анализа ширины зон, и записывать результат в отдельный выходной файл. Все возможности должны быть реализованы в режиме по требованию и совмещаться между собой без логических противоречий. В случае обработки спин-поляризованных расчетов анализ должен быть проведен для каждого спинового канала отдельно, а вывод информации совмещен, что необходимо для описания систем с магнитным упорядочением. Поддержка работы с пакетом визуализации Gnuplot также должна быть сохранена.

Учитывая, что подавляющая часть пакетов для моделирования работает под операционной системой Linux (или другими UNIX-подобными операционными системами), то следует придерживаться таких правил разработки, которые позволят органично использовать разрабатываемое ПО в рамках философии UNIX, т.е. руководствоваться принципами Макилроя [13].

Разрабатываемый анализатор должен быть компактным, обладать высокой скоростью работы и являться кроссплатформенным решением. Учитывая описанные требования для разработки, был выбран язык C++, преимущественно ввиду наличия контейнерных классов в стандартной библиотеке шаблонов STL. Взаимодействие осуществляется через командную строку. В качестве сборочной системы используем make под Linux и переносимый диалект, поддерживаемый nmake под Windows. Сборка может быть осуществлена любым компилятором с поддержкой стандарта C++11. Работоспособность и тестирование под Linux проведены с использованием компиляторов проектов GCC (g++), LLVM (clang++) и Intel (icpc), под Windows с использованием MSVC.

III. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Все описанные требования реализованы в полном объеме в текущей версии 0.3.2 разрабатываемого анализатора, который поставляется в виде единственного исполняемого файла для Linux или Windows, включающего в себя справочную информацию и примеры задания параметров и опций. Запуск

осуществляется стандартным образом: `PROGNAME <PARAMS AND OPTIONS> FILE`. Здесь `PROGNAME` имя программы, `PARAMS AND OPTIONS` – параметры и их опции, `FILE` – файл с «сырыми» данными, генерируемый пакетом `OpenMX`. По умолчанию файл с «сырыми» данными имеет расширение `Band`, например `TEST.Band`. Программа устроена таким образом, что программе достаточно указать только `TEST` или `TEST.` (с точкой). Полное имя также поддерживается, но его разумнее задавать, когда оно отличается от стандартного. В текущей версии доступны следующие параметры:

- h выводит информацию помощь по использованию программы;
- v выводит информацию о версии программы;
- i проводит анализ запрошенного файла и выдает результат в эмулятор терминала;
- w проводит анализ зон и записывает индекс зоны, ее максимум, минимум и ширину в файл `seedname-BS-WIDTH.out`;
- t Выводит информацию о времени, затраченном на чтение, запись файлов, а также полное время с учетом анализа;
- g Создает файлы, необходимые для работы пакета визуализации `Gnuplot`;
- s Задаёт сдвиг в электронвольтах для зон;
- b Выбирает зоны в диапазоне указанных индексов для обработки и записи в выходной файл `seedname-BS.out`;
- vbm Выводит значение максимума валентной зоны с повышенной точностью.

Запуск программы без параметров конвертирует все зоны из исходного файла и записывает их в выходной файл без дополнительных уведомлений. Пример работы программы показан на рис. 1.

```
f:\EDACONF>PROGNAME -i TEST

ELECTRONIC STATES ANALYZER

Fermi energy : -5.003 eV
Spin-polarized : FALSE
Total calculated states : 102
Valence band states : 26
Conductance band states : 76
Valence band maximum : -0.383 eV (below of the Fermi level)
Conductance band minimum : 0.285 eV (above of the Fermi level)
Band gap : 0.668 eV

RECIPROCAL LATTICE ANALYZER

Reciprocal cell vectors (bohr)
1.0639434 0.6142681 -0.0000000
0.0000000 1.2285361 0.0000000
0.0000000 -0.0000000 0.2757001

K-PATH (fractional)
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.500000 0.000000 0.000000 G M
40 0.500000 0.000000 0.000000 0.000000 0.333333 0.000000 M K
40 0.333333 0.333333 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 K G
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.500000 G A
40 0.000000 0.000000 0.500000 0.500000 0.000000 0.500000 A L
40 0.500000 0.000000 0.500000 0.000000 0.333333 0.500000 L H
40 0.333333 0.333333 0.500000 0.000000 0.000000 0.500000 H A

K-PATH (cartesian (bohr))
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.5319717 0.3071340 0.000000 G M
40 0.5319717 0.3071340 0.000000 0.3546478 0.6142681 0.000000 M K
40 0.3546478 0.6142681 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 K G
40 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.1378501 G A
40 0.000000 0.000000 0.1378501 0.5319717 0.3071340 0.1378501 A L
40 0.5319717 0.3071340 0.1378501 0.3546478 0.6142681 0.1378501 L H
40 0.3546478 0.6142681 0.1378501 0.000000 0.000000 0.1378501 H A
```

Рисунок 1. Результат работы анализатора программы на тестовом файле `TEST.Band` в командной строке Windows

Размер исполняемого файла составляет 74 Кбайт для Windows и 63 Кбайт для Linux. Потребление ресурсов зависит от размера анализируемого файла и составляет обычно менее 1 Мбайта оперативной памяти. Типичное время работы анализатора составляет десятки миллисекунд. Исходный код компактен и имеет менее 900 строк. Для работы кода нужны библиотеки, присутствующие в любой операционной системе, а именно стандартная библиотека и рантайм C++. В данный момент рассматривается расширение возможностей для анализа и внедрение нового функционала. Используемая архитектура программы позволяет обеспечить поддержку анализа для других пакетов.

III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены основные принципы работы научного программного обеспечения для исследования материалов моделирования и практические задачи анализа результатов расчета зонной структуры. Обсуждена функциональность разрабатываемого анализатора, выработаны требования к его реализации. Показано, что использование языка C++ и стандартной библиотеки шаблонов позволяет разработать и реализовать эффективное кроссплатформенное решение, компиляция которого осуществляется с помощью систем инкрементальной сборки `make` и `ptake`. Разработанный анализатор имеет компактную кодовую базу, малый размер исполняемого файла, высокую скорость работы и низкое

потребление вычислительных ресурсов. Архитектура проекта позволяет расширить функциональность анализатора и добавить поддержку форматов других пакетов для квантово-механического моделирования.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Авторы благодарят А.В. Козич и А.С. Сиротюка за их вклад в тестирование разработанного ПО.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi [et al.] // Journal of physics: Condensed matter. 2009. V. 21, No. 39. P. 395502.
- [2] Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Physical Review B. 1996. V. 54, No. 16. P. 11169.
- [3] First principles methods using CASTEP / S.J. Clark [et al.] // Zeitschrift für kristallographie-crystalline materials. 2005. V. 220. No. 5–6. P. 567-570.
- [4] Chemistry with ADF / G. Te Velde [et al.] // Journal of Computational Chemistry. 2001. V. 22, No. 9. P. 931–967.
- [5] QuantumATK: an integrated platform of electronic and atomic-scale modelling tools / S. Smidstrup [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. 2019. V. 32, No. 1. P. 015901.
- [6] Computational materials engineering: Recent applications of VASP in the MedeA® software environment / E. Wimmer [et al.] // Journal of the Korean Ceramic Society. 2016. V. 53, No. 3. P. 263–272.
- [7] Ozaki, T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // Physical Review B. 2003. Vol. 67. P. 155108.
- [8] Ozaki, T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. 2004. Vol. 69. P. 195113.
- [9] Ozaki, T. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // Physical Review B. 2005. Vol. 72. P. 045121.
- [10] Baglov, A.V. Atom species energy dependence on magnetic configurations in the perovskite yttrium orthoferrite / A.V. Baglov, L.S. Khoroshko // Doklady BGUIR. 2021. Vol. 19(8). P. 63-67.
- [11] Baglov, A. V. Crystal structure and electronic properties of rhenium disulfide / A.V. Baglov., L.S. Khoroshko // Journal of Applied Spectroscopy. 2022. Vol. 89. P. 860–864.
- [12] Evolution of structural and electronic properties standardized description in rhenium disulfide at the bulk-monolayer transition / A.V. Baglov [et al.] // Heliyon. 2024. Vol. 10. P. e28646.
- [13] Raymond, E.S. Basics of the Unix Philosophy. The Art of Unix Programming / E.S. Raymond // Addison-Wesley Professional. 2004.

DEVELOPMENT AND IMPLEMENTATION OF A BAND STRUCTURE ANALYZER FOR THE QUANTUM-MECHANICAL SIMULATION PACKAGE OpenMX

A. Baglov^{1,2}, L. Khoroshko^{1,2}

¹Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus, baglov@bsu.by

²Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus

Abstract: Commercial packages for analysis and processing of data obtained in programs for quantum mechanical modeling of materials are reviewed. The analyzer program for processing the results of calculations of the properties of the band structure of materials as an ideal complement to the OpenMX package is presented. Practical problems of analyzing calculations of the band structure of materials and the functionality of such a program are discussed. The requirements for the implementation of analyzer programs have been formulated. The functionality of the current version of the analyzer program developed by the authors was demonstrated by a test file.

Keywords: electronic structure, band dispersion, analysis, treatment, programming, C++, OpenMX.