



UvA-DARE (Digital Academic Repository)

Обзор основных методов и программ для моделирования наноразмерных систем

Prosnikov, M.A.; Krzhizhanovskaya, V.V.

Publication date

2012

Document Version

Final published version

Published in

XLI Неделя науки СПбГПУ

[Link to publication](#)

Citation for published version (APA):

Prosnikov, M. A., & Krzhizhanovskaya, V. V. (2012). Обзор основных методов и программ для моделирования наноразмерных систем. In *XLI Неделя науки СПбГПУ : материалы международной научно-практической конференции* (Vol. 6, pp. 128-130). Sankt-Peterburgskii gosudarstvennyi politekhnicheskii universitet.

General rights

It is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), other than for strictly personal, individual use, unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Disclaimer/Complaints regulations

If you believe that digital publication of certain material infringes any of your rights or (privacy) interests, please let the Library know, stating your reasons. In case of a legitimate complaint, the Library will make the material inaccessible and/or remove it from the website. Please Ask the Library: <https://uba.uva.nl/en/contact>, or a letter to: Library of the University of Amsterdam, Secretariat, Singel 425, 1012 WP Amsterdam, The Netherlands. You will be contacted as soon as possible.

ОБЗОР ОСНОВНЫХ МЕТОДОВ И ПРОГРАММ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ

Особенностями наноразмерных систем являются квантовые эффекты, которые невозможно моделировать в рамках классической механики. На современном этапе развития компьютерной техники, с ростом вычислительной мощности и совершенства программного обеспечения стало возможным использование квантово-механических методов расчета, позволяющих моделировать наночастицы, молекулы, промежуточные состояния химических реакций и т.д. [1, 5].

Целью данной работы является изучение основных методов для моделирования наноразмерных систем, а также прикладных программ, реализующих данные методы.

В работе рассмотрены три группы методов: (1) Методы молекулярной динамики [2], базирующиеся на классической механике и способные описывать системы до миллионов атомов, но не учитывающие квантовые явления, такие как электронные переходы, образование и разрушение химических связей. (2) Квантово-химические методы, например из первых принципов (*ab initio*) [3, 4], не содержащие эмпирических предположений, а использующие прямое решение уравнений квантовой механики, способные описывать системы до нескольких сотен атомов. (3) Полуэмпирические методы [4], базирующиеся на приближении Хартри-Фока и использующие экспериментальные или полученные расчетом из первых принципов данные.

Были исследованы программы, реализующие некоторые из методов расчета и, так называемые, молекулярные редакторы, использующиеся для подготовки химических структур и последующего экспортирования в программы моделирования.

В докладе будут представлены следующие программы: Gaussian [6], Accelrys Materials Studio [7], Firefly (в прошлом PC GAMESS) [8], Jaguar [9], GROMACS [10, 5], Ascalaph Designer [11], а также молекулярный редактор Avogadro. Реализуемые методы, типы лицензий, и платформы для вышеперечисленных программ приведены в таблице 1.

Более подробно рассмотрены некоторые из модулей, входящих в пакет Accelrys Materials Studio: Reflex – модуль для моделирования анализа дифракционных спектров, DMol3 – универсальный модуль, реализующий квантово-механические методы расчета для оптимизации, расчета энергии, динамики структур, CASTEP – модуль, использующий теорию

функционала плотности (DFT), позволяет моделировать и вычислять свойства кластеров, поверхностей, периодических структур для разнообразных материалов.

В результате выполнения данной работы, были изучены программные пакеты, способные рассчитывать свойства моделируемых структур в рамках квантово-механических и классических представлений, определены области применимости, так, например, для моделирования механических свойств многочастичных систем (нанокристаллы, полимеры) предпочтительно использование открытой программы GROMACS, для моделирования и анализа дифракционных спектров используются модули Reflex и Reflex Plus из пакета Accelrys Materials Studio, для оптимизации геометрии молекул программы реализующие методы функционала плотности (DFT), например Gaussian, и т.д.

В дальнейшем планируется найти применение вышеперечисленным программам в исследованиях выполняемых на кафедре ФХМиНТ, использовать полученные результаты для моделирования процессов стереохимической (полимерной) стабилизации наночастиц серебра в растворах.

Типы лицензий, операционные системы и методы для каждой из программ.

Программа	Лицензия	Операционные системы	Реализуемые методы
Gaussian	Коммерческая	Win, Linux, Mac	Молекулярная динамика, ab initio, полуэмпирические, DFT
Accelrys Materials Studio	Коммерческая	Win, Linux	Молекулярная динамика, ab initio, полуэмпирические, DFT, гибридные методы
Firefly	Академическая	Win, Linux, Mac	Молекулярная динамика, ab initio, полуэмпирические, DFT
Jaguar	Коммерческая	Win	Молекулярная динамика, ab initio, DFT
GROMACS	Открытая	Win, Linux, Mac	Молекулярная динамика
Ascalaph Designer	Открытая	Win, Linux	Молекулярная динамика, ab initio

ЛИТЕРАТУРА:

1. Учебно-методический комплекс «Компьютерное моделирование наноразмерных систем». Москва, 2008 г. -407 с.
2. Daan Frenkel, Berend Smith. «Understanding molecular simulation. From algorithms to application». Academic Press, 2006. -637 с.
3. Е.Г. Максимов, В.И. Зиненко, Н.Г. Замкова «Расчеты физических свойств кристаллов из первых принципов» Успехи физических наук. Т. 174, стр. 1145-1170, № 11, 2004 г.

4. Г.И. Кобзев «Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах». Оренбург, 2004 г. -146 с.
5. А.В. Немухин, Б.Л. Григоренко, А.А. Грановский «Молекулярное моделирование с программой PC GAMESS: от двухатомных молекул до ферментов» Вестник Московского университета, химия. Т. 45, стр. 75-102, № 2, 2004 г.
6. Официальный сайт программы Gaussian. URL: <http://www.gaussian.com/>
7. Официальный сайт программы AMS. URL: <http://accelrys.com/products/materials-studio/>
8. Официальный сайт программы Firefly. URL: <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/>
9. Официальный сайт программы Jaguar. URL: <http://www.schrodinger.com/productpage/14/7/>
10. Официальный сайт программы GROMACS. URL: <http://www.gromacs.org/>
11. Официальный сайт Ascalaph. URL: <http://www.biomolecular-modeling.com/Ascalaph>