

PACS numbers: 02.70.Ns, 89.20.Ff

АЛГОРИТМ ДЛЯ РЕАЛИСТИЧНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ГРАФИТОВЫХ СИСТЕМ

А.В. Хоменко¹, Н.В. Проданов^{1,2}

¹ Сумский государственный университет,
ул. Римского-Корсакова, 2, 40007, Сумы, Украина
E-mail: khom@mss.sumdu.edu.ua, prodk@rambler.ru

² Институт Петера Грюнберга, Исследовательский центр Юлиха,
D-52425 Юлих, Германия

Предложен алгоритм для моделирования графитовых систем методом классической молекулярной динамики с использованием реалистичных полуэмпирических потенциалов взаимодействия атомов углерода, учитывающих как короткодействующие, так и дальнедействующий вклады. Представлены результаты использования алгоритма для графитового образца. Проанализирована масштабируемость алгоритма в зависимости от размеров системы и от числа процессорных ядер, на которых проводятся вычисления.

Ключевые слова: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, ГРАФИТ, КОВАЛЕНТНЫЕ СВЯЗИ, ДИСПЕРСИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ, ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ.

*(Получено 20.10.2010, в отредактированной форме – 17.02.2011,
опубликовано онлайн – 02.04.2011)*

1. ВВЕДЕНИЕ

Графит – слоистый материал, широко применяющийся как в быту, например в качестве средства для письма в карандашах, так и в высокотехнологических приложениях в качестве твердой смазки в устройствах с подвижными компонентами и как рабочее вещество в замедлителях нейтронов ядерных реакторов [1-3]. Исследование свойств графита имеет довольно продолжительную историю, и на ранних этапах оно было главным образом нацелено на описание его макроскопических характеристик. Открытие новых графитовых систем, таких как углеродные нанотрубки и графен, привело к тому, что фокус исследований и поиск возможных применений был переведен с макроскопических масштабов на нануровень из-за соответствующих характерных размеров упомянутых материалов [4-6].

При теоретическом описании свойств низкоразмерных систем разработка феноменологических моделей часто оказывается слишком сложной задачей. Это обусловлено сильно выраженной атомистической природой наноразмерных объектов, которой нельзя пренебрегать, вводя некоторые усредненные параметры. Поэтому атомистическое моделирование, в частности методом классической молекулярной динамики (МД), стало незаменимым инструментом теоретического исследования низкоразмерных систем.

В классической МД ключевым фактором является вид потенциала, описывающего межатомные взаимодействия. Он зависит от поставленной задачи, в частности от атомарного состава и размеров рассматриваемой системы, и от результатов, которые необходимо получить [7-9]. При построении модели всегда приходится выбирать оптимальное соотношение следующих конкурирующих факторов: детальности (точности) описания поведения системы, её размеров (длительности моделирования) и машинного времени, которое тратится на численное решение задачи. Стремление точно описать все взаимодействия в системе обуславливает повышенную сложность производимых вычислений и длительные расчеты. Это приводит к тому, что детально описать оказывается возможным только малые системы, содержащие небольшое число атомов, или, возможно, более крупные системы, но на коротких временах. Упрощенное рассмотрение взаимодействий наоборот снижает вычислительные затраты и дает возможность проводить расчеты для более крупных систем и длинных временных интервалов. Однако последний подход может упускать из виду некоторые вклады, которые хотя и могут казаться незначительными, но пренебрегая ими можно получить неправильный результат или пропустить некоторые эффекты. Таким образом, существует потребность в развитии подходов, которые позволили бы, сохраняя достаточную детальность описания системы, проводить как можно более короткие по машинному времени расчеты. Благодаря развитию в последние годы параллельных вычислений имеется возможность ускорить расчеты не за счет снижения детальности описания системы, а за счет оптимизации алгоритмов и использования суперкомпьютеров [10-13].

В данной работе для реалистичной модели графитовых систем, учитывающей основные типы взаимодействий, предложен алгоритм, позволяющий, сохраняя высокую степень детальности описания взаимодействий, проводить вычисления на стандартных суперкомпьютерах для относительно больших систем.

2. МЕЖАТОМНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГРАФИТОВЫХ СИСТЕМ

2.1 Основные вклады

Особенностью графитовых систем является наличие взаимодействий с различной величиной масштаба пространственного действия.

Атомы углерода в нанотрубке или в графене связаны очень прочными короткодействующими ковалентными связями, радиус действия которых порядка 0.2 нм [14]. Прочность связей обуславливает высокие значения частот фононных колебательных мод. Например, частота моды вдоль слоя графена в графитовом образце составляет 46.3 ТГц [15]. Данный факт вынуждает использовать в расчетах малый временной шаг около 0.1 фс, что на порядок меньше типичного значения, используемого при моделировании жидкостей. Это приводит к значительно меньшей длительности моделирования.

При взаимодействии атомов углерода, находящихся в различных графитовых системах, например, двух нанотрубок, нанотрубки – графена (поверхности графита), слоев графена в графите, основную роль играет дальнедействующее притягивающее взаимодействие Ван дер Ваальса (ВДВ) (главный вклад в которое дает дисперсионное взаимодействие) с

радиусом действия порядка 1 нм [14]. Однако оно не является единственным, как показывают эксперименты и теоретические исследования, базирующиеся на *ab initio* вычислениях [1, 16, 17]. Ощутимый вклад в энергию связи слоев графена дает отталкивающее взаимодействие, обусловленное перекрытием электронных плотностей (орбиталей) между слабо взаимодействующими подсистемами (например, различными слоями графита). Хотя данное перекрытие мало, но его энергией нельзя пренебрегать, поскольку, например, именно она определяет укладку слоев в различных формах графита (т.н. α -графит с АВ укладкой слоев, или турбостратический графит с произвольной укладкой) [1, 16, 17].

Таким образом, модель, нацеленная на реалистичное описание поведения графитовых систем, должна учитывать все три вклада в потенциальную энергию системы. Рассмотрим математические выражения, использованные для полуэмпирических потенциалов указанных взаимодействий в нашей модели. В данной работе изучается графитовый образец, поэтому при описании вкладов в потенциальную энергию мы будем использовать термин «межслойное взаимодействие» для нековалентной составляющей. Однако нужно помнить, что используемый потенциал и алгоритм можно использовать для других графитовых систем, например, углеродных нанотрубок.

2.2 Функциональные формы потенциалов взаимодействия

С целью описания ковалентных связей за последние 20 лет предложено несколько полуэмпирических потенциалов [10, 18-21]. Несмотря на относительную сложность по сравнению с гармоническими потенциалами [18], наиболее популярным в классической МД является потенциал Бреннера [19, 20]. Он позволяет моделировать достаточно точно ковалентные связи не только графитовых систем, но и других аллотропных форм углерода, а также гидрокарбонатов. В последнее время встречается применение нового потенциала ReaxFF (reactive force field) [21], позволяющего используя классический подход описывать системы с точностью, близкой к точности методов квантовой химии. Однако использование ReaxFF требует больших вычислительных затрат, чем потенциала Бреннера.

В нашей модели используется потенциал Бреннера, имеющий вид:

$$V_B = \sum_i \sum_{j>i} [V^R(r_{ij}) - \bar{b}_{ij}V^A(r_{ij})]. \quad (1)$$

Здесь функции $V^R(r_{ij})$ и $V^A(r_{ij})$ являются парно-аддитивными взаимодействиями, представляющими все межатомные отталкивания (между ионными остовами и т.д.) и притяжение между валентными электронами соответственно. Величина r_{ij} – расстояние между парами ближайших атомов-соседей i и j , а \bar{b}_{ij} – член кратности связи, отражающий тип связи между атомами i и j и включающий многочастичные эффекты, необходимые для правильного описания связывания в гидрокарбонатах. Выражения для функций, фигурирующих в (1), можно найти в работе [22].

Сила, действующая на атом k вследствие ковалентной связи с другими атомами, определяется следующим образом:

$$\mathbf{f}_k = -\frac{\partial V_B}{\partial \mathbf{r}_k}. \quad (2)$$

Выражения для силы (2), полученные с использованием (1), можно найти в работе [23]. Из-за громоздкости они здесь не приводятся.

Для межслойных взаимодействий в данной работе используется RDP потенциал (registry-dependent potential), предложенный Колмогоровым и имеющий вид [16]:

$$V(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{n}_i, \mathbf{n}_j) = e^{-\lambda(n_{ij}-z_0)} [C + f(\rho_{ij}) + f(\rho_{ji})] - A \left(\frac{r_{ij}}{z_0} \right)^{-6}. \quad (3)$$

Здесь $\lambda = 36.29 \text{ нм}^{-1}$, $z_0 = 0.334 \text{ нм}$, $C = 3.030 \text{ мэВ}$, $A = 10.238 \text{ мэВ}$. Потенциал содержит пропорциональное r^{-6} ВДВ притяжение, а также экспоненциально спадающее отталкивание благодаря перекрытию волновых функций электронов из различных слоев. Для учета пространственной направленности перекрытия введена функция f , которая быстро спадает с поперечным расстоянием ρ (см. Рис. 1):

$$f(\rho) = e^{-(\rho/\delta)^2} \sum C_{2n} (\rho/\delta)^{2n}, \quad (4)$$

где $C_0 = 15.71 \text{ мэВ}$, $C_2 = 12.29 \text{ мэВ}$, $C_4 = 4.933 \text{ мэВ}$, $\delta = 0.0578 \text{ нм}$.

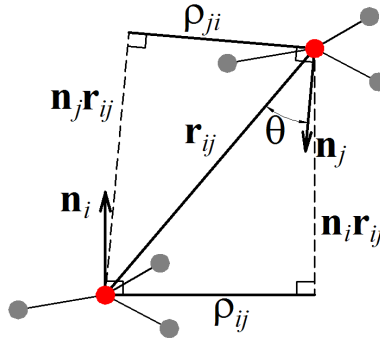


Рис. 1 – Иллюстрация величин, входящих в формулы (3)-(6)

Значение ρ определяется через расстояние r_{ij} между парами атомов i и j , принадлежащими различным слоям, и вектор \mathbf{n}_k ($k = i, j$), являющийся нормалью к sp^2 плоскости вблизи атома k :

$$\rho_{ij}^2 = r_{ij}^2 - (\mathbf{n}_i \mathbf{r}_{ij})^2, \quad \rho_{ji}^2 = r_{ij}^2 - (\mathbf{n}_j \mathbf{r}_{ij})^2. \quad (5)$$

В данной работе \mathbf{n}_k вычисляется как «локальная» нормаль, т. е. как среднее значение трех нормированных векторных произведений радиус-векторов, проведенных от атома k к его ближайшим соседям. Данная методика соответствует потенциалу RDP1 в работе [16]. Для дальнедействующего ВДВ члена расстояние отсечки принято равным $r_c = 2.7 z_0 = 0.9018 \text{ нм}$. Энергия связи слоев E_{il} рассчитывается следующим образом:

$$E_{il} = \sum_i \sum_{j>i} V(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{n}_i, \mathbf{n}_j). \quad (6)$$

В (6) суммирование выполняется по атомам углерода двух соседних слоев, и функция V определяется по формуле (3).

Сила, действующая на атом углерода вследствие межслойных взаимодействий, определяется по формуле, аналогичной (2), с заменой V_B на E_{il} . Дифференцирование даёт:

$$\mathbf{f}_i = -\frac{\partial E_{il}}{\partial \mathbf{r}_i} = -\sum_i \sum_{j>i} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i} = -\sum_i \sum_{j>i} \frac{dV}{dr} \mathbf{e}_{ri}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dr} = e^{-\lambda(r-z_0)} \left[-\lambda (C + f(\rho_{ij}) + f(\rho_{ji})) + \frac{df}{d\rho} \Big|_{\rho_{ij}} \frac{d\rho_{ij}}{dr} + \frac{df}{d\rho} \Big|_{\rho_{ji}} \frac{d\rho_{ji}}{dr} \right] + \\ + \frac{6A}{z_0} \left(\frac{r}{z_0} \right)^{-7}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\frac{df}{d\rho} = \frac{2\rho}{\delta^2} e^{-(\rho/\delta)^2} \left[C_2 - C_0 + \left(\frac{\rho}{\delta} \right)^2 \left(C_4 \left[2 - \left(\frac{\rho}{\delta} \right)^2 \right] - C_2 \right) \right], \quad (9)$$

$$\frac{d\rho_{ij}}{dr} = \left[r^2 - (\mathbf{n}_i \mathbf{r})^2 \right]^{-0.5} \left[r - (\mathbf{n}_i \mathbf{r}) \cos \angle(\mathbf{r}, \mathbf{n}_i) \right], \quad (10)$$

$$\frac{d\rho_{ji}}{dr} = \left[r^2 - (\mathbf{n}_j \mathbf{r})^2 \right]^{-0.5} \left[r - (\mathbf{n}_j \mathbf{r}) \cos \angle(\mathbf{r}, \mathbf{n}_j) \right]. \quad (11)$$

В (7) \mathbf{e}_{ri} обозначает единичный вектор вдоль направления радиус-вектора \mathbf{r}_{ij} , соединяющего атомы i и j , из различных слоев. Символом $\angle(\mathbf{r}, \mathbf{n}_i)$ обозначен угол между радиус-вектором и локальной нормалью.

3. МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМ

В данной работе рассматривается α -графит с АВ укладкой слоев. Образец состоит из двух или трех слоев (Рис. 2) и содержит 16 или 24 шестиугольников атомов углерода («пчелиных сот») вдоль обеих осей x и y . Периодические граничные условия приложены к образцу в плоскости xy . Атомы взаимодействуют по законам, описанным в предыдущем разделе. Уравнения движения интегрируются методом Верле [9, 10] с временным шагом 0.1 фс. Данная система представляет основу для моделирования поверхностных явлений и расслоения графитового образца в работах [22, 24, 25].

Как известно, для расчета сил, получаемых из потенциала Бреннера, требуются довольно значительные вычислительные затраты (по сравнению с простыми парными потенциалами) вследствие многочастичной природы и сложности члена кратности связи \bar{b}_{ij} в (1) [10, 23]. Простой перебор соседей оказывается крайне неэффективным, и для уменьшения времени вычислений обычно используют связанные списки ячеек и параллелизацию на основе доменной декомпозиции [10, 23].

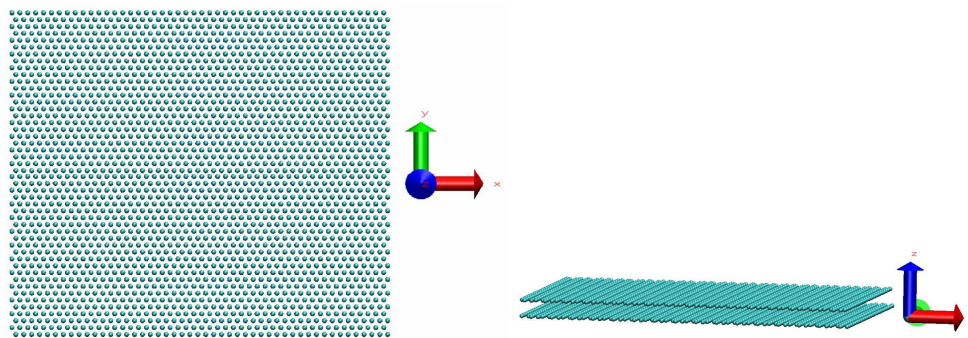


Рис. 2 – Вид сверху и сбоку одной из исследуемых систем

Метод связанного списка ячеек позволяет организовать информацию о положениях атомов таким образом, что требуемые вычислительные затраты оказываются пропорциональны числу атомов N (а не квадрату числа атомов, как при переборе всех соседей) [9, 10, 23]. Идея метода состоит в следующем. Как отмечалось, ковалентные связи имеют малый радиус действия, порядка 0.2 нм. Поэтому для потенциала Бреннера вводится радиус отсечки $r_{Bc} = 0.2$ нм. Если расстояние между атомами более этого значения, то считается, что ковалентная связь отсутствует. Область моделирования разделяется на кубические ячейки, длина ребра которых превышает указанный радиус отсечки r_{Bc} (см. Рис. 3, левый рисунок). Тогда, если атомы приписываются к ячейкам, исходя из их текущих координат, то очевидно, что взаимодействия возможны только между атомами находящимися или в одной и той же ячейке, или в непосредственно соседних ячейках. Если ни одно из этих условий не выполняется, то атомы должны находиться, по крайней мере, на расстоянии радиуса отсечки. Организация индексов атомов в каждой из ячеек в связанные списки позволяет достичь пропорциональности времени вычислений числу атомов N . Отметим, что при выполнении вычислений производится обход ячеек по определенному правилу. В нашем алгоритме производится сканирование ячеек по пути, отмеченному стрелками на Рис. 3 слева для данной ячейки m . Данный обход ячеек мы будем называть *длинным циклом для ячейки m* .

Однако даже использование списка ячеек обычно не позволяет проводить расчеты для довольно больших систем. Поэтому часто есть необходимость в использовании параллельных вычислений и суперкомпьютеров, в которых расчеты протекают параллельно на нескольких ядрах. Наиболее популярным подходом для параллелизации кода молекулярной динамики для суперкомпьютеров с распределенной памятью является так называемая доменная декомпозиция, использовавшаяся также в данной работе. Ее суть в следующем [9, 10, 23]. Область моделирования разбивается на подобласти, каждая из которых присваивается одному процессору или процессорному ядру (см. Рис. 3, справа). Все атомы, находящиеся в данной подобласти в некоторый момент времени, принадлежат соответствующему процессору. Когда атом перемещается между подобластями, все связанные с ним переменные явно передаются из одного процессора другому. Существует экономия памяти, а также коммуникаций, необходимых для передачи

информации об атомах, поскольку сравнительно немного атомов делают такие перемещения на протяжении одного временного шага. Более важно то, что если в подобласти сравнительно много атомов и если используется короткодействующий потенциал, то большая часть взаимодействий будет иметь место между атомами подобласти, и относительно немного – между атомами в прилегающих подобластях. Чтобы дать пристанище последним, копии координат атомов, близких к любой границе подобласти, перед вычислением взаимодействий также помещаются в процессор, управляющий смежной подобластью. Данные атомы часто называются виртуальными или атомами-копиями. Эта передача информации также требует малую долю атомов и коммуникаций. В целом, для эффективной работы метода доменной декомпозиции требуются каналы связи с высокой пропускной способностью и малыми задержками, т.е. быстрая сеть. Детали реализации кода можно найти в работах [9, 10].

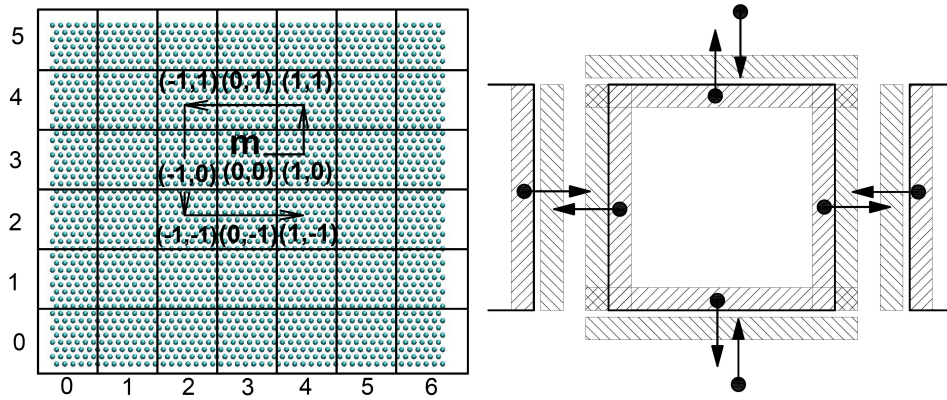


Рис. 3 – Схематическая иллюстрация разбиения области моделирования на ячейки и сканирования ячеек по длинному пути в плоскости xu (слева); принцип доменной декомпозиции (справа)

Наличие короткодействующих и дальнедействующего взаимодействий в графитовых системах представляет определенную трудность для оптимальной реализации кода. Это обусловлено тем, что в данном случае для каждого типа взаимодействий требуется свой радиус отсечки. Поэтому при использовании метода ячеек необходимы ячейки различного размера. Кроме того, присутствие нормалей в RDP потенциале делает его по существу многочастичным и усложняет процедуру расчета взаимодействий. Указанные факторы обуславливают необходимость разработки специального алгоритма для расчетов взаимодействий. В данной работе предлагается один из вариантов алгоритма, в котором мы используем ячейки двух размеров: с ребром 0.2 нм для потенциала Бреннера и для расчета нормалей, а также с длиной ребра d , определяемой по формуле

$$d = \sqrt{r_c^2 - z_0^2}, \quad (12)$$

где $z_0 = 0.334$ нм – равновесное расстояние между слоями α -графита, $r_c = 2.7 z_0 = 0.9018$ нм – расстояние отсечки для ВДВ взаимодействия. Будем называть большие ячейки *ячейками Колмогорова*, а мелкие ячейки

для расчета нормалей – *ячейками нормалей*. Перед выполнением расчетов необходимы некоторые подготовительные действия, такие как разбиение на ячейки области моделирования, определение истинного числа ячеек Колмогорова (без копий) и ширины ячеек Колмогорова и ячеек нормалей.

Расчет сил, действующих на атомы в графите, состоит в вычислении ковалентных взаимодействий, определяемых потенциалом Бреннера, и ВДВ вклада и вклада от перекрытия орбиталей из RDP потенциала. Расчет ковалентных сил проводится по алгоритму из работы [23] независимо от двух других вкладов. Для последних использовался Алгоритм 1, приводимый ниже.

Алгоритм 1

I Для всех ячеек Колмогорова:

1. Получить индекс $m1$ ячейки Колмогорова;
2. Длинный цикл для ячеек столбца, в котором находится ячейка $m1$, в плоскости xy :
 - i) определить индекс $m2$ соседней ячейки Колмогорова;
 - ii) для каждого атома i из ячейки $m1$:
 - a) определить индекс $m1Norm$ ячейки нормали для атома i ;
 - b) длинный цикл для ячейки нормали $m1Norm$:
 - получить индекс $m3$ ячейки нормали;
 - путем перебора каждого атома k из ячейки $m3$ найти трех ближайших соседей атома i ;
 - рассчитать радиус-векторы от атома i к трем ближайшим соседям, и соответствующие нормированные векторные произведения. Найти их среднее значение – это искомая нормаль \mathbf{n} ;
 - b) конец;
 - c) для каждого атома j из ячейки $m2$:
 - 1) определить расстояние r_{ij} ;
 - 2) если атомы i и j из различных слоев, то:
 - A) определить индекс $m2Norm$ ячейки нормали атома j ;
 - B) длинный цикл для ячейки нормали $m2Norm$:
 - получить индекс $m3$ ячейки нормали;
 - путем перебора каждого атома k из ячейки $m3$ найти трех ближайших соседей атома j ;
 - рассчитать радиус-векторы от атома j к трем ближайшим соседям, и соответствующие нормированные векторные произведения. Найти их среднее значение – это искомая нормаль \mathbf{n}_j ;
 - B) конец;
 - C) определить относительные положения слоев и соответствующие направления нормалей;
 - D) рассчитать энергию связи слоев и силы по формулам (6)-(11);
 - 2) конец;
 - c) конец;
 - ii) конец;
 2. Конец длинного цикла по ячейкам столбца;

I Конец цикла по всем ячейкам Колмогорова.

Отметим, что данный алгоритм можно использовать как для последовательных вычислений, так и для параллельных, поскольку он не включает явной передачи данных между процессорами. Все коммуникации происходят за циклом расчета сил (перед ним и после него). В случае параллельного кода стоит обратить внимание на обработку периодических граничных условий. Более подробное обсуждение этого вопроса и пример кода можно найти в [9].

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

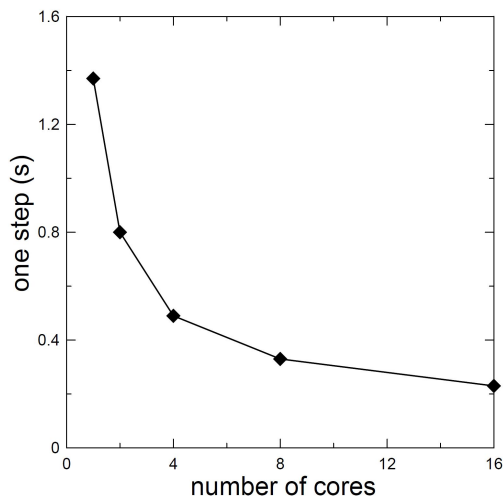


Рис. 4 – Длительность расчета одного временного шага в зависимости от числа процессорных ядер

Приведенный выше алгоритм реализован на языке С. Для параллелизации использовалась спецификация MPI, отладка кода проводилась с использованием Microsoft MPI, окончательная версия кода компилировалась и собиралась с использованием реализации MPICH2 [26]. Расчеты проводились на бевульф [27] кластере СумГУ, состоящем из 12 узлов. Каждый узел содержит CPU Intel® Core™ 2 Duo E6600, 2.4 GHz, сеть 1Gbit Ethernet.

На Рис. 4 представлена зависимость времени расчета одного временного шага для графитового образца, содержащего 16×16 «пчелиных сот» в слое вдоль осей x и y , и 3 слоя, всего 4608 атомов. Видно, что время нелинейно спадает, приближаясь к насыщению, когда число процессоров превышает значение 16. Можно сказать, что масштабируемость вычислений имеет довольно малое значение. Это обусловлено низкой пропускной способностью сети 1Gbit Ethernet кластера, а также малым размером системы, что приводит к повышенным затратам на передачу данных по сравнению с длительностью вычислений, производимых каждым ядром.

Анализ данных из табл. 1 показывает, что длительность расчета главным образом определяется не общим числом атомов в системе, а количеством слоев, поскольку время расчета межслойных взаимодействий очень быстро увеличивается с ростом числа слоев.

Как показывают временные зависимости энергии связи слоев E_{il} и расстояния между слоями d_{il} , приведенные на Рис. 5, эти величины флуктуируют возле значений около 42 мэВ и 0.333 нм, соответственно. Аналогичные результаты были получены для систем других размеров. Данные числа близки к экспериментальным значениям [16]. Однако энергия связи отличается приблизительно на 15% от значения 48 мэВ, полученного для RDP теоретически в [16]. Несоответствие можно объяснить конечным расстоянием отсечки, использовавшимся в наших расчетах для ВДВ вклада. Также в [16] рассматривался статический образец, в то время как динамические связи в нашей модели приводят к тепловым колебаниям атомов, обуславливающим флуктуации нормалей, что также может быть причиной указанного расхождения значений.

Таблица 1 – Длительность расчета одного шага для различных систем

Количество «сот» по x	Количество «сот» по y	Количество слоев	N	Расчет одного временного шага (с)
16	16	2	3072	0.120
16	16	3	4608	0.233
24	24	2	6912	0.185
24	24	3	10368	0.360

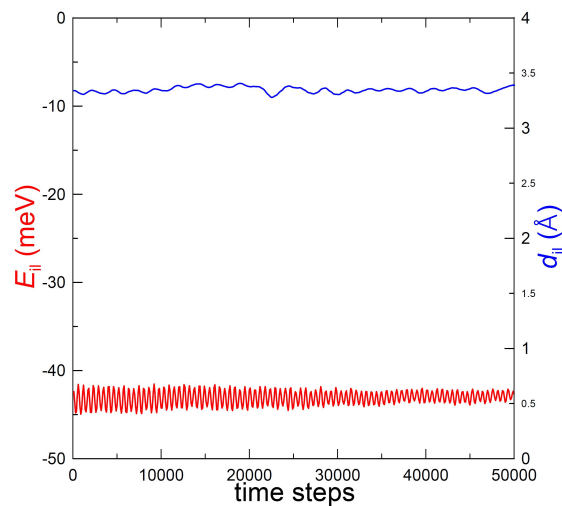


Рис. 5 – Временные зависимости энергии связи слоев E_{il} и расстояния между слоями d_{il} для системы содержащей 24×24 «пчелиных сот» вдоль осей x и y и состоящей из двух слоев

5. ВЫВОДЫ

В работе предложен алгоритм расчета взаимодействий в графитовых системах, учитывающий все основные вклады в потенциальную энергию, который базируется на методе списка связанных ячеек и предусматривает возможность параллелизации на основе доменной декомпозиции. Запуски расчетов на бевульф-кластере показали относительно низкую масшта-

бируемость, которая вероятнее всего связана с латентностью сетевых коммуникаций кластера. Также расчеты свидетельствуют о том, что с ростом числа слоев в графитовом образце основная вычислительная нагрузка приходится на определение дальнедействующего вклада в энергию связи слоев. В целом, алгоритм можно использовать для разнообразных графитовых систем, и примеры его применения для изучения расслоения графитового образца можно найти в работах [22, 24, 25].

ALGORITHM FOR REALISTIC MODELING OF GRAPHITIC SYSTEMS

A.V. Khomenko¹, N.V. Prodanov^{1,2}

¹ Sumy State University,
2, Rimsky-Korsakov str., 40007, Sumy, Ukraine
E-mail: khom@mss.sumdu.edu.ua, prodk@rambler.ru

² Peter Grunberg Institut, FZ-Juelich,
D-52425 Juelich, Germany

An algorithm for molecular dynamics simulations of graphitic systems using realistic semiempirical interaction potentials of carbon atoms taking into account both short-range and long-range contributions is proposed. Results of the use of the algorithm for a graphite sample are presented. The scalability of the algorithm depending on the system size and the number of processor cores involved in the calculations is analyzed.

Keywords: MOLECULAR DYNAMICS, GRAPHITE, COVALENT BONDS, DISPERSION INTERACTION, PARALLEL COMPUTING.

АЛГОРИТМ ДЛЯ РЕАЛІСТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ГРАФІТОВИХ СИСТЕМ

О.В. Хоменко¹, М.В. Проданов^{1,2}

¹ Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, 40007, Суми, Україна
E-mail: khom@mss.sumdu.edu.ua, prodk@rambler.ru

² Інститут Петера Грюнберга, Дослідницький центр Юліху,
D-52425 Юліх, Німеччина

Запропоновано алгоритм для моделювання графітових систем методом класичної молекулярної динаміки із використанням реалістичних напівемпіричних потенціалів взаємодії атомів вуглецю, які враховують як короткодійні, так і далекодійні внески. Представлено результати використання алгоритму для графітового зразка. Проаналізовано масштабованість алгоритму залежно від розмірів системи і від числа процесорних ядер, на яких проводяться обчислення.

Ключові слова: МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, ГРАФІТ, КОВАЛЕНТНІ ЗВ'ЯЗКИ, ДИСПЕРСІЙНА ВЗАЄМОДІЯ, ПАРАЛЕЛЬНІ ОБЧИСЛЕННЯ.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. G. Savini, Y.J. Dappe, S. Oberg, J.-C. Charlier, M.I. Katsnelson, A. Fasolino, *Carbon* **49**, 62 (2011).
2. B.K. Yen, B.E. Schwickert, M.F. Toney, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 4702 (2004).
3. A. Ito, H. Nakamura, *Thin Solid Films* **516**, 6553 (2008).

4. *Carbon Nanotubes - Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications* (Eds. A. Jorio, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus) (Berlin, Heidelberg: Springer: 2008).
5. A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
6. A.K. Geim, *Science* **324**, 1530 (2009).
7. M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon Press: 1987).
8. D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation* (London: Academic Press: 2002).
9. D.C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd ed.* (Cambridge: Cambridge University Press: 2004).
10. M. Griebel, S. Knapek, G. Zumbusch, *Numerical Simulation in Molecular Dynamics*, (Berlin, Heidelberg: Springer: 2007) (<http://wissrech.ins.uni-bonn.de/research/projects/tremolo/>).
11. J.A. van Meel, A. Arnold, D. Frenkel, S.F.P. Zwart, R.G. Belleman, *Mol. Sim.* **34**, 259 (2008).
12. W. Liu, B. Schmidt, G. Voss, W. Muller-Wittig, *Comp. Phys. Commun.* **179**, 634 (2008).
13. J.A. Anderson, C.D. Lorenz, A. Travesset, *J. Comp. Phys.* **227**, 5342 (2008).
14. L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond, 3 ed.*, (Ithaca, New York: Cornell University Press: 1960).
15. F. Tuinstra, J.L. Koenig, *J. Chem. Phys.* **53**, 1126 (1970).
16. A.N. Kolmogorov, V.H. Crespi, *Phys. Rev. B* **71**, 235415 (2005).
17. A. Carlson, T. Dumitrica, *Nanotechnology* **18**, 065706 (2007).
18. N. Sasaki, K. Kobayashi, M. Tsukada, *Phys. Rev. B* **54**, 2138 (1996).
19. D.W. Brenner, *Phys. Rev. B* **42** No15, 9458 (1990).
20. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 783 (2002).
21. D. Sen, K.S. Novoselov, P.M. Reis, M.J. Buehler, *Small* **6**, 1108 (2010).
22. A.V. Khomenko, N.V. Prodanov, *Functional Materials* **17**, No2, 230 (2010).
23. Caglar A., Griebel M., *Molecular Dynamics on Parallel Computers* (Julich: World Scientific: 1999).
24. A.V. Khomenko, N.V. Prodanov, *Carbon* **48**, 1234 (2010).
25. N.V. Prodanov, N.V. Khomenko, *Surf. Sci.* **604**, 730 (2010).
26. <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpich2/>
27. *Beowulf Cluster Computing with Windows* (Ed. T. Sterling) (Cambridge, Massachusetts: The MIT Press: 2002).