

Защита проекта зимней школы

**Расчет и анализ
рентгенодифракционных
данных для
нестрогопериодических
кристаллических структур**

Студент Гусельников М.Д.,
ММФ НГУ 4 курс
Руководители: Киреев С.Е.,
к.х.н. Комаров В.Ю.

Актуальность:

В современном материаловедении есть задача определения расположения атомов в кристаллах.

Методы дифракционного структурного анализа позволяют определять расположения атомов по экспериментальной дифракционной картине. Напрямую эта задача не решается, т.к. при построении дифракционной картины теряется часть информации. Поэтому используются итерационные методы решения с применением обратных расчётов.

В настоящее время актуальны исследования дефектных структур, для которых необходимо использовать масштабные атомные модели.

В рамках данной задачи существует подзадача вычисления интенсивности дифракции для модели атомной структуры.

Схожие продукты:

[AMESS \(US\)](#)

NWChem

[ORCA](#)

PQS

PSI

Q-Chem

TURBOMOLE

Gaussian

.....

Цель работы:

Разработка ПО для построения атомной структуры и расчета интенсивности дифракции во множестве точек обратного пространства, глобальная оптимизация, возможность работы с масштабными атомными структурами.

Задачи:

1. Разработка и реализация алгоритма построения различных случаев кристаллических структур:
 - a. периодическая (строго)
 - b. модулированная
 - c. квазикристаллическая

2. Разработка и реализация алгоритма расчета интенсивности для заданной кристаллической структуры в заданной точке обратного пространства.

3. Оптимизация и параллелизация алгоритма расчета интенсивности, оценка сложности.

Виды структур:

Строгопериодическая структура:

$$r_f(t) = r_f + t_f,$$

$$r_c(t) = r_f(t) \cdot M.$$

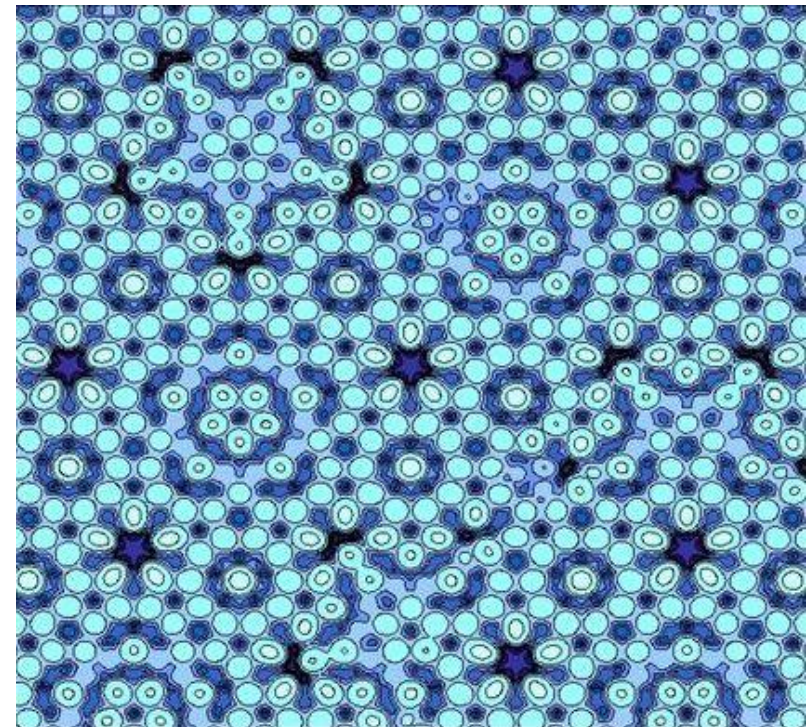
Модулированная структура:

$$r_f(t) = r_f + t_f + m_f,$$

$$r_c(t) = r_f(t) \cdot M.$$

Квазикристаллическая структура:

Более сложный вид симметрии.



Расчет интенсивности дифракции:

$$\mathcal{I}_{hkl} = |F_{hkl}|^2 \quad \text{- интенсивность дифракции в точке обратного пространства}$$

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^N f_j \exp(2\pi i \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{s}) \quad \text{- структурный фактор рассеивания}$$

$$f = f_0 + f_1 + if_2 \quad \text{- атомный фактор рассеивания}$$

Сложность алгоритма: $O(MN)$

M - количество точек обратного пространства

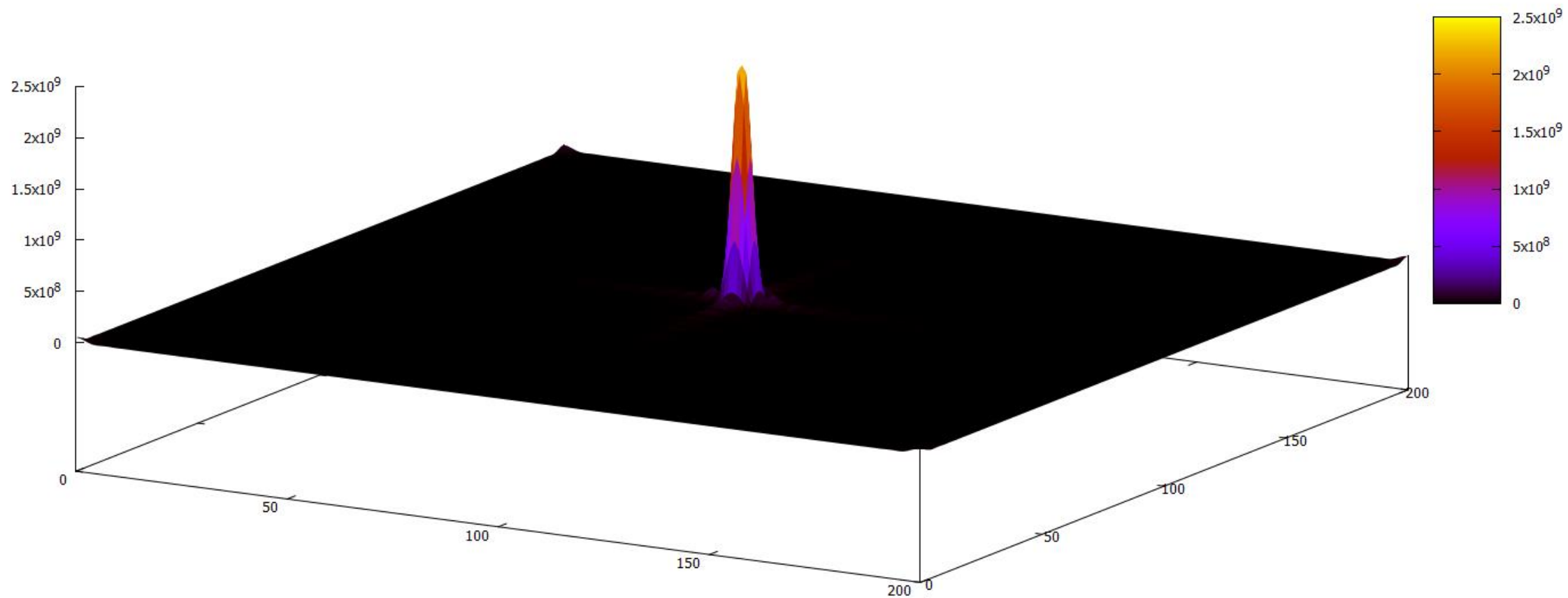
N - количество в кристаллической структуре

Реализация:

- 1) Реализован алгоритм построения строгопериодических и модулированных структур.
- 2) Реализован алгоритм расчета интенсивности для заданной двумерной области пространства.
- 3) Алгоритм был распараллелен с помощью OpenMP.

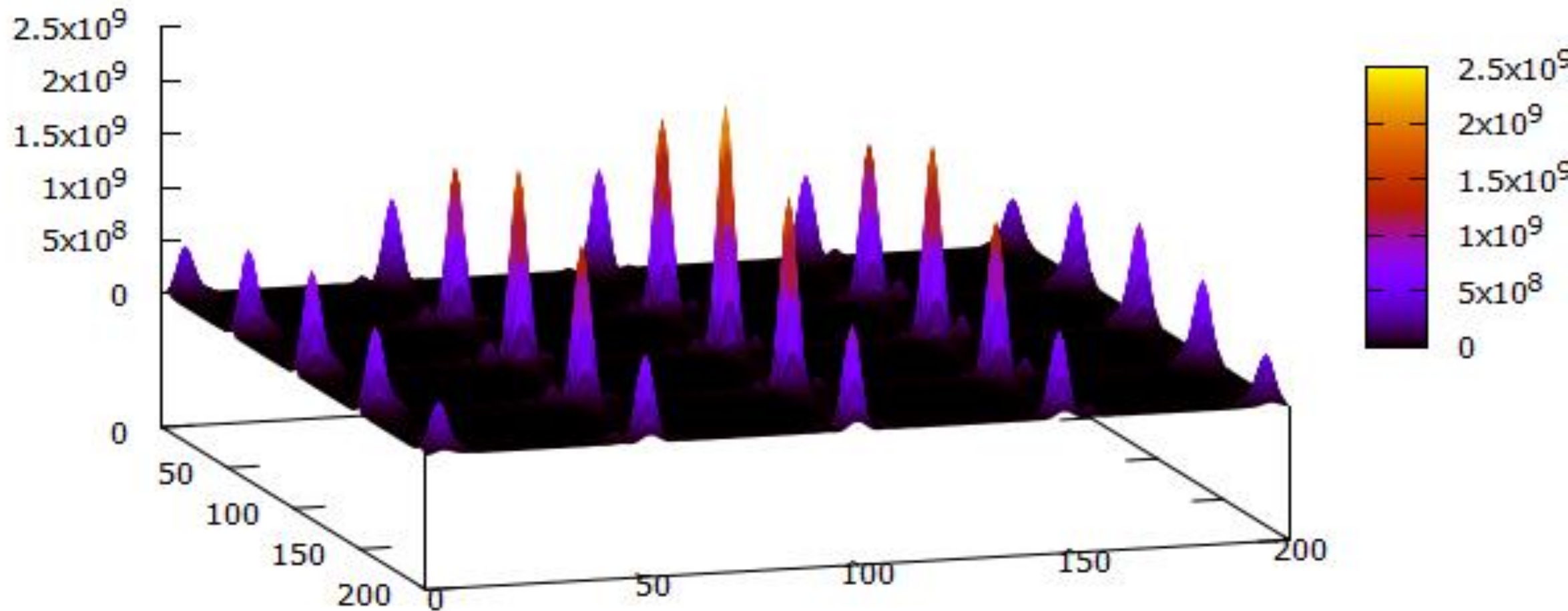
Интенсивность для строгопериодической решетки:

"Out.txt" matrix



Интенсивность для модулированной
решетки:

"Out.txt" matrix



Способы расчета атомного фактора рассеивания:

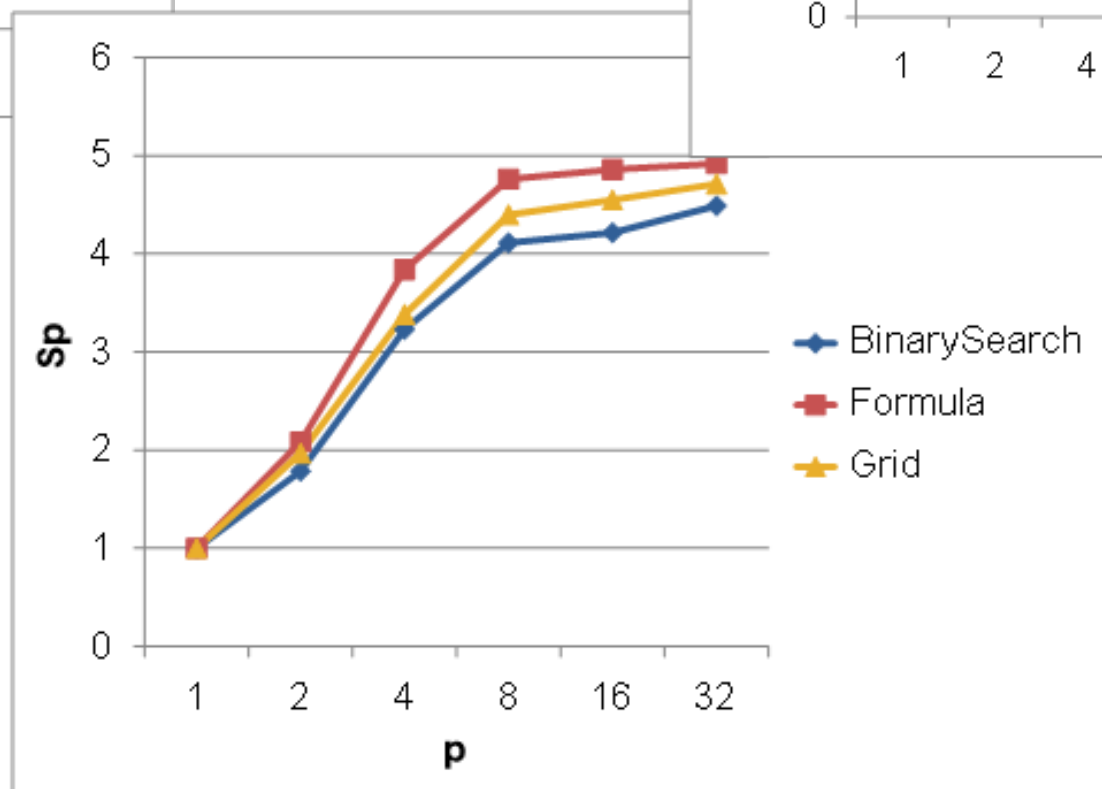
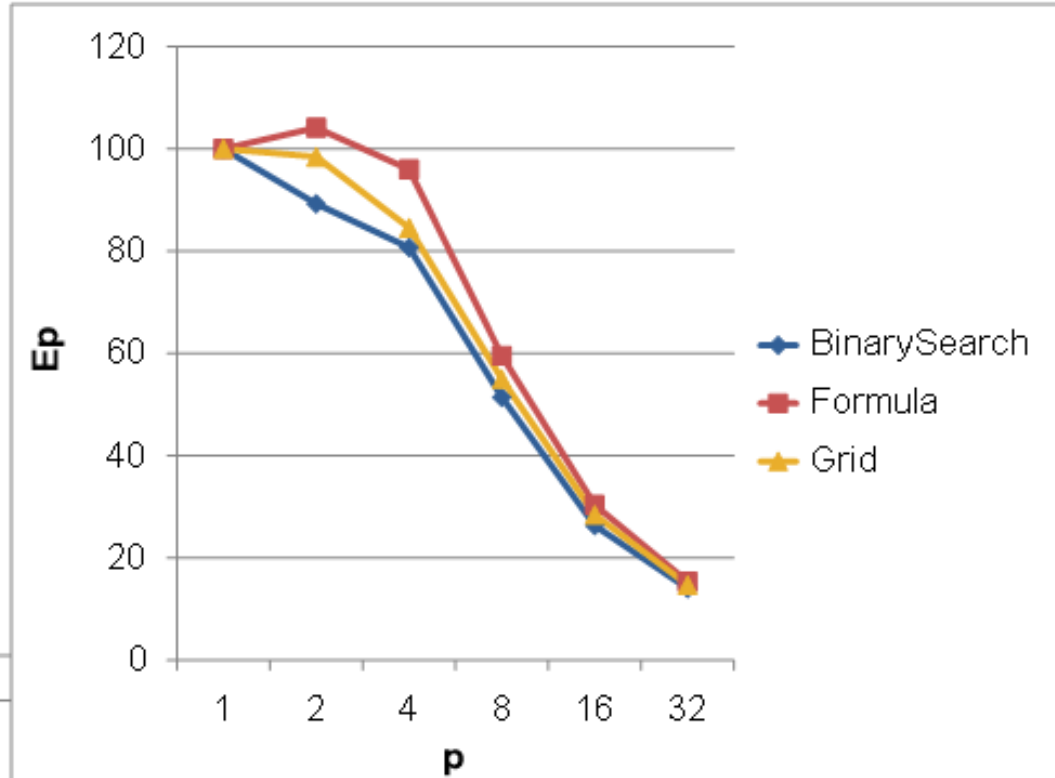
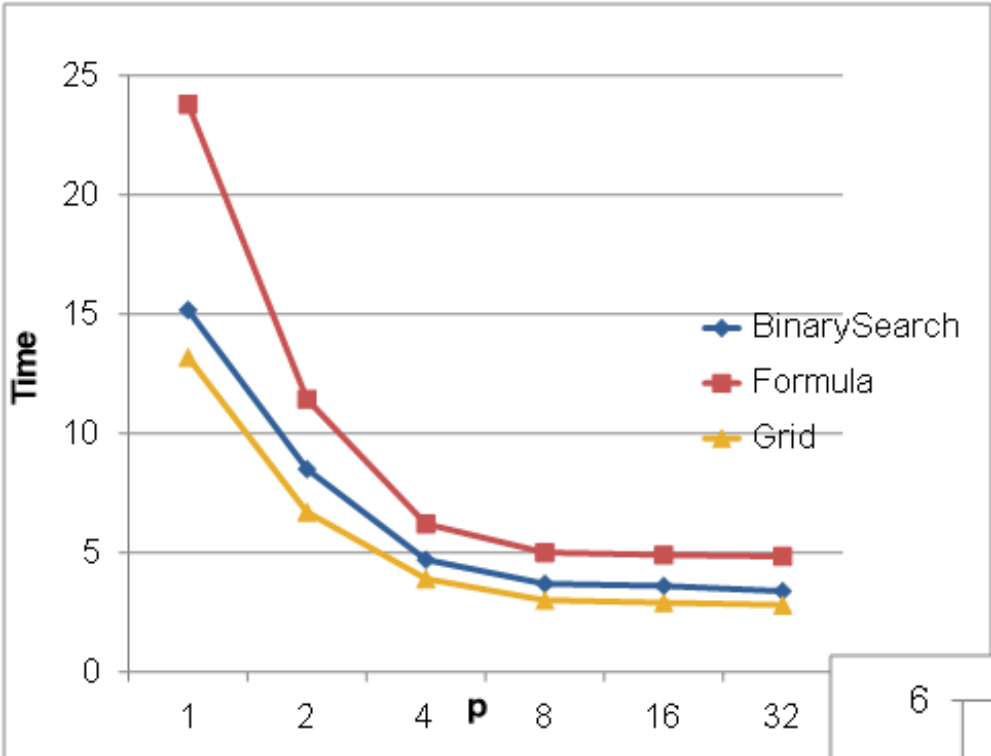
1) Бинарный поиск по заданной неравномерной таблице (у каждого вида атомов своя)

2) Переход к равномерной таблице и прямой поиск по ней.

3) Расчет по аналитически заданной интерполяционной формуле:

$$f(\sin \theta / \lambda) = \sum_{i=1}^4 a_i \exp(-b_i \sin^2 \theta / \lambda^2) + c$$

$$\ln\{f[(\sin \theta) / \lambda]\} = \sum_{i=0}^3 a_i s^i$$

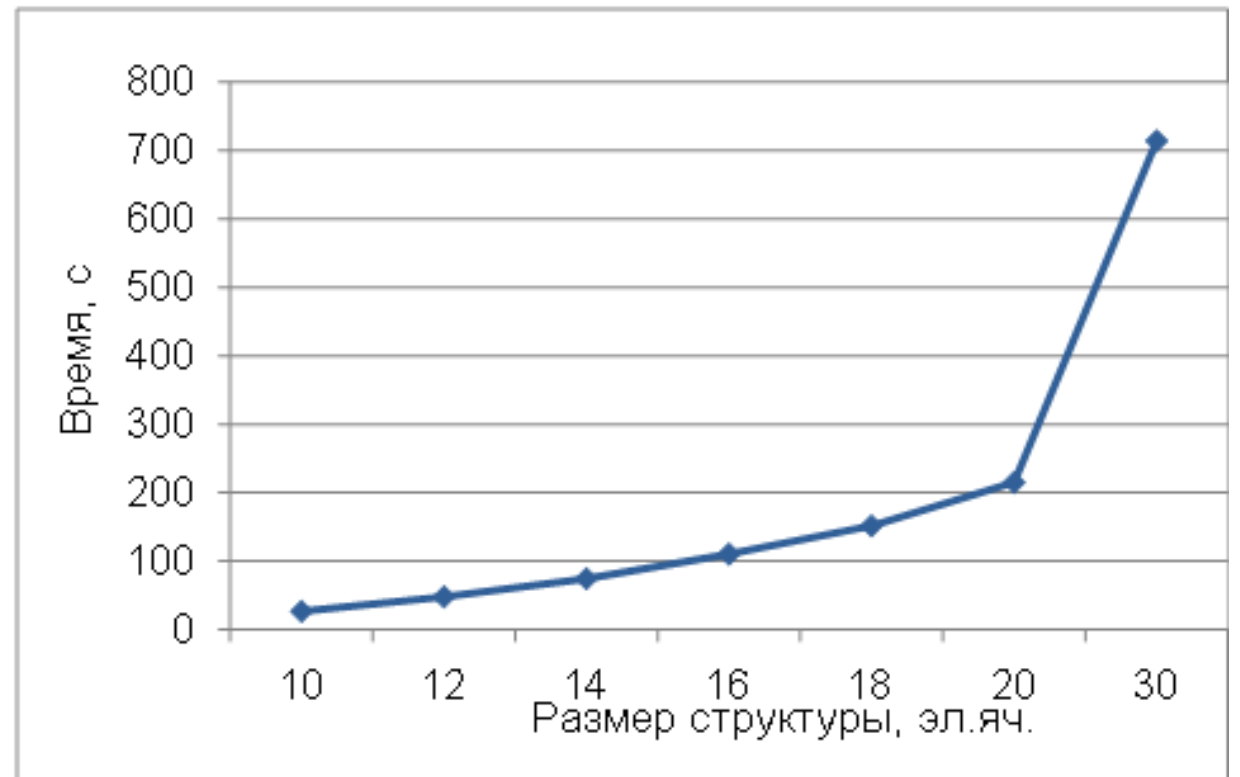
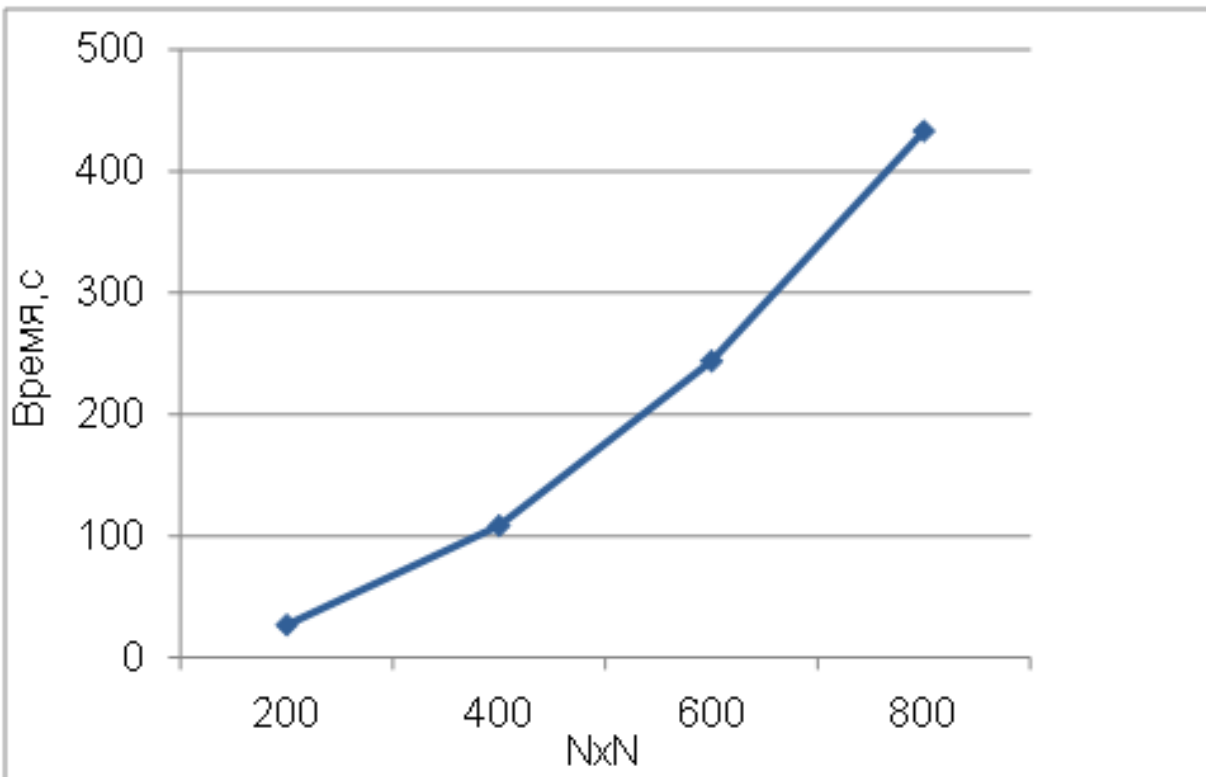


Intel Core i7 7700 HQ
(4 ядра, с включенным
гипертредингом).

Кристаллическая структура
содержит 8000 атомов.

Количество точек: 200x200.

Зависимость времени расчета от размера задачи.



N - количество точек в обратном пространстве.
Было заданно 4000 атомов.

Количество атомов = Количество базисных атомов* (количество эл ячеек)^3.
Было заданно 200x200 точек обратного пространства.

Заключение:

- 1) Был разработан и реализован алгоритм построения строгопериодической и модулированной структуры.
- 2) Был разработан инструментарий для поиск интенсивности дифракции.
- 3) Были проведены эксперименты вычисления зависимости времени работы программы от заданных параметров. Из чего была получена необходимость параллелизации.
- 4) Был разработан параллельный код.
- 5) Были проведены эксперименты расчетов атомного фактора рассеивания, в зависимости от выбранного алгоритма.

Планы на будущее

Содержательные планы:

- 1) Интегрирование интенсивности по области обратного пространства, а не расчет в заданных точках.
- 2) Построение квазикристаллических структур.
- 3) Расширение уже имеющегося функционала.

Организационные планы:

- 1) Сдача тезисов и выступление на МНСК-2018
- 2) Сдача тезисов и выступление на ICAM-2018
- 3) Подготовка и защита диплома

Спасибо за внимание.