

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА СТРУКТУР МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКОЙ ФОТОНИКИ

*А.С. Зайцев, П.В. Белозёрова*

*Костромской государственный университет им. Н.А.Некрасова*

Проведен расчет структуры и параметров молекул фталоцианина и его производных с атомом кислорода О, гидроксилом ОН, двумя атомами кислорода ОО, атомом кислорода и гидроксилом ООН на 32 ядрах вычислительного кластера в программе NWChem. Сделано сравнение полученных результатов с результатами, рассчитанными последовательной программой Firefly на компьютере AMD Phenom/Linux Firefly version под Linux. Отмечены ускорение вычислений и их более высокая точность.

В настоящее время благодаря уникальным электронным свойствам производных фталоцианина их активно используют в органических полупроводниковых устройствах [1], в том числе для изготовления TFT-матриц и активного слоя CD-R дисков, солнечных элементах, фотодиодах и др. Для вычислений электронной энергии и параметров электронной структуры таких молекул требуются значительные вычислительные ресурсы, поэтому разумно использовать суперкомпьютерные кластеры.

Для таких вычислений создано большое количество коммерческих и свободно-распространяемых программ квантово-химических расчетов. Наибольший интерес представляют программы, относящиеся к категории открытого программного обеспечения (Open Source) в связи с их доступностью и возможностью изучения и модификации исходного кода. В данной работе была использована программа NWChem [2], хорошо зарекомендовавшая себя при вычислениях на многопроцессорных кластерах.

Использовался вычислительный кластер Костромского государственного университета им. Н.А. Некрасова. Параллельные вычисления проводились на 4 узлах по 8 ядер (всего 32 ядра). Оперативная память использовалась полностью.

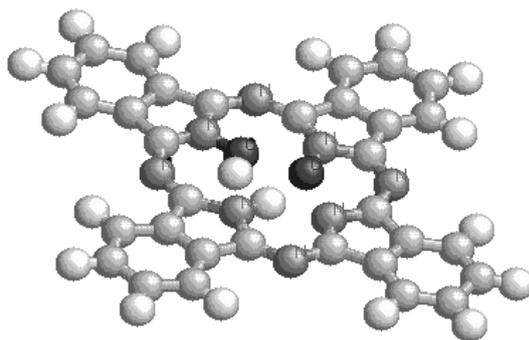


Рис. 1. Рассчитанная структура производной молекулы фталоцианина с атомом кислорода О и гидроксилом ОН

Проведен расчет структуры и параметров разных производных молекул фталоцианина: с атомом кислорода О, гидроксилом ОН, двумя атомами кислорода ОО, атомом кислорода и гидроксилом ООН (рис. 1). Результаты вычислений сравнили с результатами, полученными с помощью последовательной программы Firefly на компьютере AMD Phenom/Linux Firefly version под Linux. По точности результаты на кластере получились лучше, чем на AMD (энергия меньше, что должно быть по теории). Это свя-

зано с тем, что на AMD использовался более легкий базис: не по три d,p-функции на атом, а по одной. Программа при этом считает быстрее и требует меньше ресурсов, но точность ухудшается.

По термодинамическим функциям – энтальпии и энтропии результаты практически совпали. Геометрические и силовые параметры оптимизированной структуры в обоих случаях были близки. По скорости расчетов процессорное время на кластере получилось меньше в 37.7 раза, чем на AMD, а общее уменьшилось в 5.2 раза. Особенностью программы NWChem является требование больших ресурсов памяти. Но это может быть особенностью сборки и конфигурации операционной системы.

### **Литература**

1. Hiroko Yamada, Naoko Kamio, Manami Kawano. Photocurrent generation by benzoporphyrin films prepared by a solution process // *J. Porphyrins Phthalocyanines*. – 2007. – № 11. – P. 383-390.
2. Valiev M., Bylaska E.J., Govind N., Kowalski K., Straatsma T.P, van Dam H.J.J., Wang D., Nieplocha J., Apra E., Windus T.L., de Jong W.A. NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations // *Comput. Phys. Commun.* – 2010. – V. 181. – P. 1477-1489.