



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2025-23-5-83-92>

УДК 004.457

КРОСС-ПЛАТФОРМЕННЫЙ АНАЛИЗАТОР ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПАКЕТА КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ OpenMX

А. В. БАГЛОВ^{1,2}, Л. С. ХОРОШКО^{1,2}

¹Белорусский государственный университет (Минск, Республика Беларусь)

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

Аннотация. В статье описаны архитектура и функциональность кросс-платформенного анализатора зонной структуры для обработки результатов расчета популярного специализированного пакета моделирования свойств материалов OpenMX. Продемонстрирована его работа на примере тестового задания. Представлены коммерческие пакеты для анализа и обработки данных, получаемых в программах для квантово-механического моделирования материалов. Показано, что пакету OpenMX недостает программы-анализатора для обработки результатов расчетов строения зонной структуры материалов. Рассмотрены практические задачи анализа расчетов зонной структуры материалов и функциональность такой программы, сформулированы требования к ее реализации. Предлагаемый анализатор по общим временным затратам не уступает по производительности существующему аналогу, при этом имеет более широкий функционал, включая базовый анализ и постобработку данных с возможностью опциональной настройки выходного файла, сохраняемого в удобном текстовом формате. Данная разработка перспективна в контексте универсализации для обеспечения совместимости с другими широко применяемыми коммерческими пакетами квантово-механического моделирования.

Ключевые слова: электронная структура, моделирование, энергетические зоны, анализ данных, пост-обработка, программирование, C++, Gnuplot, OpenMX.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Благодарность. Авторы благодарят А. В. Козич и А. С. Сиротюка за их посильный вклад в тестирование разработанного программного обеспечения.

Для цитирования. Баглов, А. В. Кросс-платформенный анализатор зонной структуры материалов для пакета квантово-механического моделирования OpenMX / А. В. Баглов, Л. С. Хорошко // Доклады БГУИР. 2025. Т. 23, № 5. С. 83–92. <http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2025-23-5-83-92>.

CROSS-PLATFORM MATERIAL BAND STRUCTURE ANALYZER FOR THE OpenMX QUANTUM MECHANICAL MODELING PACKAGE

ALEKSEY V. BAGLOV^{1,2}, LIUDMILA S. KHOROSHKO^{1,2}

¹Belarusian State University (Minsk, Republic of Belarus)

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

Abstract. The article describes the architecture and functionality of a cross-platform band structure analyzer for processing the calculation results of the popular specialized OpenMX material properties modeling package. Its operation is demonstrated using a test task as an example. Commercial packages for analyzing and processing data obtained in programs for quantum mechanical modeling of materials are presented. It is shown that the OpenMX package lacks an analyzer program for processing the results of calculations of the structure of materials. Practical problems of analyzing the calculations of the band structure of materials and the functionality of such a program are considered, and requirements for its implementation are formulated. The proposed analyzer is not inferior in performance to the existing analog in terms of overall time costs, while it has a wider

functionality, including basic analysis and post-processing of data with the ability to optionally customize the output file saved in a convenient text format. This development is promising in the context of universalization to ensure compatibility with other widely used commercial quantum mechanical modeling packages.

Keywords: electronic structure, modelling, energy bands, data analysis, postprocessing, programming, C++, Gnuplot, OpenMX.

Conflict of interests. The authors declare no conflict of interests.

Gratitude. The authors thank A. V. Kozich and A. S. Sirotyuk for their contribution to testing the developed software.

For citation. Baglov A. V., Khoroshko L. S. (2025) Cross-Platform Material Band Structure Analyzer for the OpenMX Quantum Mechanical Modeling Package. *Doklady BGUIR*. 23 (5), 83–92. <http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2025-23-5-83-92> (in Russian).

Введение

В настоящее время в вычислительной физике конденсированного состояния разработано большое количество теоретических методов для описания материалов произвольного состава и атомарно-кристаллического строения на языке фундаментальной физики. На практике широко применяется численное квантово-механическое моделирование методами из первых принципов как хорошо зарекомендовавший себя, эффективный и надежный подход для исследования и описания широкого спектра свойств материалов. Получаемые в таких численных экспериментах результаты в значительной степени расширяют и дополняют результаты традиционных экспериментальных исследований.

В некоторых случаях численные эксперименты являются предпочтительными, особенно, когда проведение натурных экспериментальных исследований серьезно затруднено (например, построение фазовой диаграммы состояний вещества в области экстремальных давлений) или невозможно (например, анализ свойств соединений короткоживущих сверхтяжелых элементов). В контексте бурного развития нанотехнологий и наноматериаловедения задачи прогнозирования и исследования физических и химических свойств материалов различной размерности (в том числе в виде квантовых точек, нанотубулярных объектов, ультратонких пленок и иных наноразмерных форм) являются одними из наиболее востребованных и актуальных.

Краткий анализ состояния вопроса и постановка задачи

Численные эксперименты, направленные на исследование структурных, электронных, магнитных, оптических и прочих свойств, проводят с использованием различных специализированных пакетов, в которых реализованы разные теоретические подходы. Обычно в состав пакета входит набор программ, объединенных вокруг некоторой центральной программы. Так, например, устроен пакет Quantum ESPRESSO – интегрированный набор компьютерных программ (или приложений) для расчетов электронной структуры и моделирования материалов в наномасштабе [1]. Однако возможна и реализация всего пакета в одном исполняемом файле. Наиболее известные примеры данного подхода – пакеты VASP [2] и CASTEP [3]. Как правило, все программы в таких пакетах являются CLI-программами, т. е. взаимодействие с ними осуществляется через программный механизм CLI (Command Line Interface – интерфейс командной строки). Управление программой из пакета выполняется с помощью одного или нескольких входных файлов в текстовом формате, содержащих в себе набор инструкций, необходимых для решения поставленных в вычислительном эксперименте задач. Также в рамках работы с пакетом (программой) могут дополнительно использоваться файлы, содержащие (чаще всего в бинарном виде) результаты вычислений, выполненных предварительно самим пакетом или сторонней программой. Как показывает практика, этот подход позволяет добиваться максимальной эффективности работы исследователя и программного обеспечения (ПО). Тем не менее такая реализация взаимодействия справедливо считается не слишком «дружественной» к пользователю, что является одним из ключевых элементов высокого «порога вхождения» в данную область науки, особенно для молодых ученых и студентов.

В том числе и по этой причине разрабатываются пакеты, включающие привычный большинству GUI (Graphical User Interface – графический пользовательский интерфейс), призванный

упростить планирование, проведение и анализ численного эксперимента: построить и сразу же визуализировать атомно-кристаллическую структуру исследуемого объекта; управлять параметрами проведения численного моделирования; провести обработку результатов вычислений, в том числе на лету, и визуализировать их. К подобным решениям можно отнести продвинутые коммерческие пакеты, такие как SCM [4], QuantumATK [5], MedeA [6] и др. Хотя перечисленные пакеты самодостаточны для организации исследовательской работы в рамках численного квантово-механического моделирования и включают в себя широкий функционал доступных теоретических моделей, они могут быть сопряжены с другими пакетами, например, с VASP, и работать как «драйвер», использующий функциональные возможности присоединенного пакета вместо встроенных возможностей. Заметим, что такой вариант не является принципиально отличающимся с точки зрения устройства архитектуры коммерческих пакетов, поскольку GUI в них фактически является лишь фронтендом, автоматизирующим подготовку входных файлов для CLI-бэкенда с последующим анализом выходных результатов в удобном для исследователя виде. CLI-бэкенд, реализующий непосредственно численное моделирование, может использоваться без запуска GUI, а потому может быть заменен на произвольный после реализации соответствующих интерфейсов. Фактически одним из критериев популярности того ли иного пакета для квантово-механического моделирования являются не только его возможности, но и наличие эффективного вспомогательного ПО, реализующего различную пред- и постобработку результатов вычислений. Однако для менее популярных и некоммерческих пакетов вспомогательное ПО зачастую развито относительно слабо, либо вовсе отсутствует.

Авторы статьи в процессе работы активно применяли пакет для численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов OpenMX, использующий теории функционала плотности и псевдопотенциала, а также базис численных атомно-центрированных численных псевдоатомных орбиталей [7–14], бесплатно распространяемый под лицензией GPLv3. Одним из важнейших аспектов исследования электронного строения материалов, особенно пониженной размерности, с которыми сталкиваются все исследователи, является изучение дисперсии энергетических зон (или зонной структуры) – спектра собственных значений оператора энергии электрона в пространстве волновых векторов, развертка которого обычно осуществляется вдоль особых точек высокой симметрии первой зоны Бриллюэна, что подробно описано в большом количестве учебных и научных изданий, например в [15, 16].

OpenMX, как большинство пакетов, рассчитывает собственные значения запрошенного числа состояний для каждой точки в пространстве волновых векторов (k -точки) и предоставляет ее пользователю в виде обычного текстового файла. Дальнейшая обработка «сырых» данных, построение, анализ и визуализация зонной структуры являются задачей исследователя. В составе пакета OpenMX присутствует программа bandgnu13, считывающая «сырые» выходные данные и приводящая их к формату, удобному для графического построения. Дополнительно bandgnu13 подготавливает скрипт для широко используемой в научном сообществе программы визуализации Gnuplot, позволяя быстро визуализировать полученный результат в операционной системе Linux. Однако предлагаемых возможностей программы bandgnu13 совершенно недостаточно для полноценной и эффективной работы исследователя. Насколько известно, существует лишь один вариант коммерческого ПО, который может использовать OpenMX как бэкенд – Winmostar, которое может проводить анализ и визуализацию только в рамках себя, без возможности экспорта данных для работы в других пакетах.

Таким образом, разработка специализированного ПО для работы с «сырыми» данными о зонной структуре, проведение их анализа, обработка и эффективное представление в удобном для исследователя формате являются востребованной и актуальной задачей. В статье описывается разработанное авторами ПО в рамках решения этой задачи – анализатор зонной структуры материалов для пакета квантово-механического моделирования OpenMX.

Описание разработанного решения

Исходя из того факта, что подавляющее большинство научных пакетов для численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов, в том числе и OpenMX, разрабатывается для операционной системы Linux (или других Unix-подобных операционных систем), следует придерживаться таких правил разработки, которые позволят органично исполь-

зывать предлагаемое ПО в Unix, т. е. действовать в рамках принципов Макэлроя [17]. Поскольку обработка результатов часто проводится пользователями на собственных устройствах, разумным было бы обеспечить кросс-платформенный анализатор.

Для обеспечения высокой скорости и компактности было принято решение применять для написания анализатора язык программирования C++, преимущественно ввиду наличия контейнерных классов в стандартной библиотеке шаблонов STL. Как и пакеты для моделирования, включая целевой OpenMX, разработанный анализатор является CLI-приложением, что позволяет использовать его также и на устройствах без графической оболочки, например, непосредственно на вычислительных кластерах для анализа без передачи выходного файла с «сырыми» данными. Благодаря своей компактности разработанный анализатор поставляется в виде единственного исполняемого файла для Linux или Windows, включающего в себя справочную информацию и примеры задания параметров и опций для исполнения. Решение является монолитным и не требует для своей работы никаких дополнительных библиотек, кроме стандартной библиотеки C++ и математической библиотеки.

В состав пакета OpenMX входит программа bandgnu13, несколько упрощающая работу с файлом, содержащим результаты расчета зонной структуры. Программа bandgnu13 может преобразовывать результаты из файла с «сырыми» данными в файл, пригодный после некоторых ручных правок для дальнейшего импорта и визуализации с применением специального ПО: OriginLab OriginPro, IBM SPSS, MS Excel, QtiPlot и др. Для первичной визуальной оценки bandgnu13 также подготавливает входной файл для визуализации с помощью пакета Gnuplot – CLI-программы, предназначенной для построения графиков и широко используемой исследователями во всем мире. Однако для запуска Gnuplot все равно необходимо использовать терминал, а адекватный уровень визуализации требует ручной правки подготовленного программой bandgnu13 входного файла для Gnuplot. Фактически bandgnu13 является просто конвертером, а последующие анализ и визуализация данных все равно требуют участия и значительных временных затрат исследователя. Также стоит заметить, что bandgnu13 может быть скомпилирована только в операционной системе Linux.

Предлагаемый анализатор обладает значительно большей оригинальной функциональностью и работает в двух режимах:

- 1) чтение «сырых» данных, их анализ и запись результатов анализа в стандартный поток вывода;
- 2) чтение «сырых» данных, их преобразование, обработка и запись специальным образом оформленных данных в выходные файлы.

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

Результат анализа пространственной подсистемы включает в себя информацию о векторах трансляции обратной решетки и координаты точек высокой симметрии, вдоль которых рассчитываются промежуточные точки. Координаты высокосимметричных точек выводятся как во внутренних координатах (в единицах решетки), так и в обычных декартовых в ортогональном репере. Как это принято в пакетах для численного квантово-механического моделирования, авторы статьи использовали атомную систему единиц, где единица измерения длины – боровский радиус, равный примерно 5,291772 Å.

Результат анализа электронной подсистемы включал в себя информацию о количестве рассчитанных состояний, в том числе занятых и не занятых, энергию Ферми, количестве спин-овых каналов, участвующих в расчете. В случае пересечения зонами уровня Ферми полезно знать число таких зон, а также их индексы, что необходимо для визуализации поверхности Ферми в специализированном ПО. В случае наличия щели в энергетическом спектре электронов, т. е. если исследуемый материал является полупроводником или диэлектриком, выводятся информация о ширине этой щели в электронвольтах, а также значения минимума зоны проводимости и максимума валентной зоны. В случае обработки спин-поляризованных расчетов, что необходимо для описания систем с магнитным упорядочением, анализ проводится для каждого спинового канала отдельно, а вывод результатов совмещен.

Основываясь на результатах анализа положения экстремумов энергетических зон и уровня Ферми, можно смещать 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. Такое смещение используется и для построения зонных диаграмм гетеропереходов. В целом при построении зонной структуры наиболее часто анализируется и визуализируется та часть энергетического спектра, которая расположена вблизи уровня Ферми, поэтому более глубоко- и высоколежащие состояния могут быть отброшены при обработке «сырых» данных.

Анализатор позволяет осуществлять выбор зон, которые должны быть извлечены из файла с «сырыми» данными, смещены по энергии при необходимости, конвертированы и записаны в выходной файл. Также проводится анализ ширины зон, а результат записывается в отдельный выходной файл, что позволяет быстро оценить дисперсию зон и определить индексы зон вблизи уровня Ферми или пересекающих его. Все возможности реализуются в режиме «по требованию» и совмещаются между собой без логических противоречий. В случае задания некорректных параметров в программе выводится сообщение об ошибке, и работа анализатора завершается. Для Linux-версии анализатора оставлена поддержка Gnuplot, что позволяет сразу визуализировать обработанные данные для первичной оценки. В процессе исследований авторы статьи усовершенствовали работу этой части программы в сравнении с bandgnu13 таким образом, чтобы исследователь в два клика мышью мог визуализировать полученный результат без дополнительных действий по коррекции входного файла для Gnuplot, генерируемого анализатором по запросу.

Автоматизация сборки осуществляется с помощью переносимого диалекта makefile, поддерживаемого утилитами make и nmake под Linux и Windows соответственно. Сборка может быть осуществлена любым компилятором с поддержкой стандарта C++11. Работоспособность и тестирование под Linux проводились с использованием C++-компиляторов GCC, LLVM и Intel, под Windows – с использованием MSVC (версия Community Edition).

Применение разработанного анализатора: описание и примеры

Запуск анализатора осуществляется в терминале (командной строке) 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 этот файл имеет расширение Band, например, TEST.Band. Программа устроена таким образом, что достаточно передать ей только TEST (так называемый seedname) или TEST. (с точкой в конце), остальная часть будет дополнена автоматически. Полное имя также поддерживается, но его разумнее задавать, когда оно отлично от стандартного, например, TEST-strong-pressure_01.bs, что может быть востребовано при пакетной обработке большого количества зонных расчетов. В текущей версии анализатора 0.3.4 доступны следующие параметры:

- h – выводит информацию о помощи 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 – задает смещение в электронвольтах для зон;
- b – выбирает зоны с запрошенными индексами для анализа и обработки с последующей записью в выходные файлы;
- 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. На рис. 1 представлен пример анализа файла Diamond.Band. Показано, что всего в расчете участвовало 26 зон, первые четыре из которых являются валентными. Ширина энергетической щели (запрещенной зоны) составляет 4,229 эВ, что совпадает с опубликованными расчетными данными при сравнимом уровне теории. На основе анализа осуществляется выбор первых восьми энергетических зон, смещен-

ных на величину энергии, равную разнице между энергией Ферми и максимумом верхней валентной зоны, с записью файла, содержащего информацию о минимуме, максимуме и ширине выбранных зон, с выводом затраченного времени чтение/запись. Полученные данные визуализированы в пакете MS Excel.

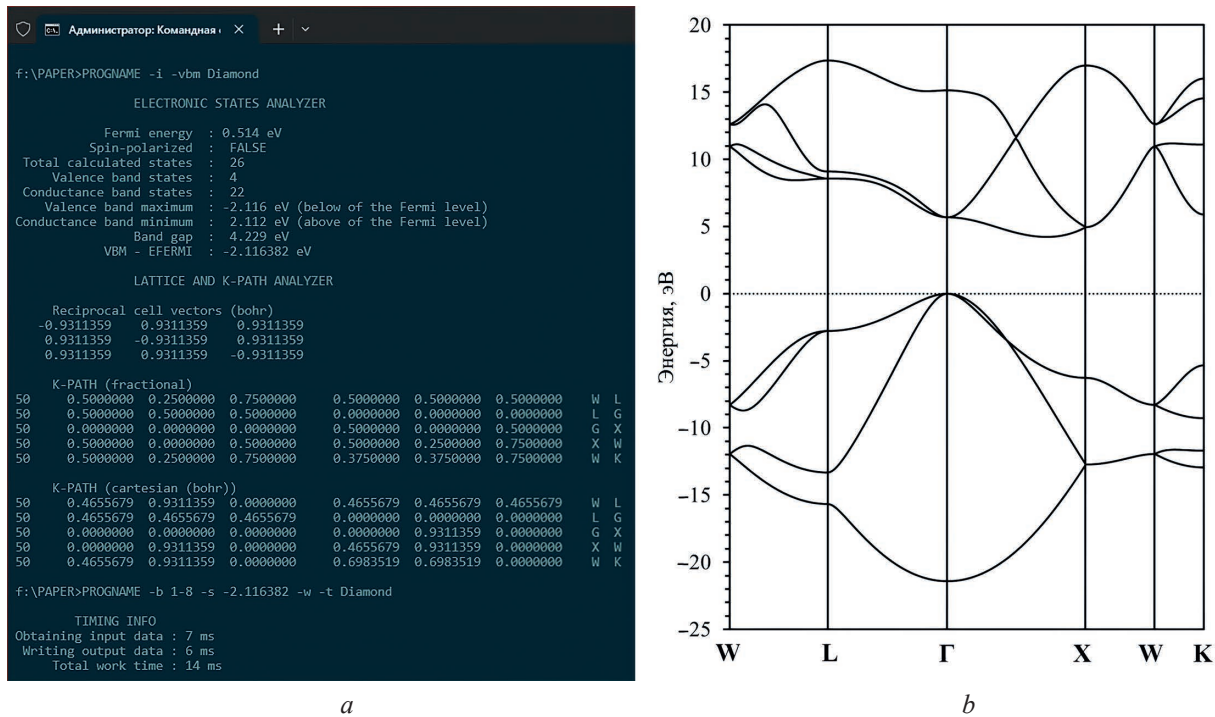


Рис. 1. Результат работы анализатора в операционной системе Windows на тестовой задаче:

a – анализ данных для полупроводника (алмаз) в не спин-поляризованном случае;

b – визуализация обработанных данных из выходного файла в MS Excel

Fig. 1. Result of analyzer work on the test task under OS Windows:

a – data analysis for semiconductor (diamond) in no spin-polarized case;

b – visualization of processed data from output file in MS Excel

Выходные текстовые файлы Diamond-BS.out и Diamond-BS-WIDTH.out содержат информацию о зонной структуре и ширине зон соответственно. Структура данных файла Diamond-BS.out представлена на рис. 2.

Diamond-BS.out			
	DISTANCE	ENERGY	BAND
1	0.000000	-11.94309	1
2	0.013437	-12.06064	1
3	0.026874	-12.18164	1
4	0.040311	-12.30496	1
5	0.053748	-12.42968	1
6	0.067185	-12.55503	1
7	0.080622	-12.68039	1
8	0.094059	-12.80526	1

a

Diamond-BS-WIDTH.out				
	BAND	MIN	MAX	WIDTH
1	1	-21.42469	-11.94309	9.481601
2	2	-13.32244	-0.001497	13.32094
3	3	-9.276030	-0.000000	9.276030
4	4	-8.283623	0.000000	8.283623
5	5	4.228833	10.97082	6.741984
6	6	4.962560	11.53899	6.576429
7	7	5.692181	17.00297	11.31079
8	8	11.76239	17.37849	5.616100

b

a

b

Рис. 2. Структура выходных файлов анализатора: *a* – файл Diamond-BS.out, содержащий информацию о зонной структуре; *b* – файл Diamond-BS-WIDTH.out, содержащий информацию о ширине зон

Fig. 2. Structure of the analyzer output files: *a* – the Diamond-BS.out file containing information about band structure; *b* – the Diamond-BS-WIDTH.out file containing information about width of bands

Первая строка представляет собой заголовки столбцов. Столбец DISTANCE содержит информацию о расстоянии между *k*-точками в обратной решетке в атомных единицах, как это принято в подавляющем большинстве пакетов численного моделирования. Столбец ENERGY содержит значение энергии *k*-точки в электронвольтах, более удобных для представления, чем атомные

единицы (Хартри). Столбец BAND содержит индекс зоны, к которой относятся данные столбцов DISTANCE и ENERGY. Эта информация является вспомогательной и служит для ориентирования при просмотре данных в текстовом редакторе и может быть удалена после импорта в пакет для визуализации. В структуре данных файла Diamond-BS-WIDTH.out присутствуют сведения о ширине зон: столбец BAND аналогично предыдущему указывает на индекс зоны, а MIN, MAX и WIDTH – на минимум, максимум и ширину этой зоны. В случае спин-поляризованных расчетов схема остается такой же с добавлением соответствующих столбцов/строк для различных спиновых состояний.

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 – десятки миллисекунд. Исходный код компактен и содержит менее 900 строк. Для работы кода нужны библиотеки, присутствующие в любой операционной системе, а именно – стандартная библиотека и рантайм C++. В перспективе рассматриваются расширение возможностей для анализа и внедрение нового функционала. Используемая архитектура программы позволяет обеспечить поддержку анализа данных и для других пакетов.

Анализ производительности

Понимание производительности того или иного программного решения – важный аспект компьютерных наук. Обычно такой анализ проводят с использованием специализированных инструментов для профилирования и трассировки, например, Perforator или утилит для BPF с последующим построением флеймграфов. Однако с практической точки зрения для исследователя-физика наиболее важен один параметр – время работы программы. Разработанный анализатор имеет встроенную возможность замеров времени на операции чтения и записи, использующую стандартную для языка C++ библиотеку chrono. По причине отсутствия другого ПО, сравнить разработанное решение представляется возможным лишь с упомянутым ранее штатным решением для OpenMX bandgnu13. Так как последнее не имеет встроенной возможности замеров времени, был модифицирован его код таким образом, чтобы получить эту информацию.

Поскольку bandgnu13 может только конвертировать данные, оценим лишь скорость чтения и записи для обеих программ. Как ранее было сказано, bandgnu13 может быть скомпилирована только под операционную систему Linux, поэтому в качестве тестовой системы использовался типовой ПК на основе Core i3-6100, 8 Гб оперативной памяти DDR4-2133 в одноканальном режиме; использовалась операционная система Ubuntu, установленная в WSL2, размещаемая на HDD. Следует отметить, что в таком варианте тестирования эффективность работы анализатора ниже из-за накладных расходов системы виртуализации и замедления работы с файловой системой накопителя. В качестве теста был использован специально подготовленный файл, включающий 420 000 k -точек, распределенных по 2100 зонам. Заметим, что обычно на практике решаемые задачи на один-два порядка меньше (рис. 1). Все зоны анализировались на положение минимума, максимума и значение ширины, затем конвертировались и записывались в выходной файл, дополнительно создавался файл для Gnuplot. Затем созданные файлы удалялись, а операции анализа и записи результатов повторялись согласно заданному количеству циклов, что в рассматриваемом случае составляло 100 раз. Результаты тестирования программ представлены в табл. 1.

Таблица 1. Тестирование производительности программ через временные затраты на чтение и запись
Table 1. Testing the performance of programs through the time spent on reading and writing

Тестирование	Анализатор	Bandgnu13
Чтение, мс	178,30 ± 11,63	102,51 ± 3,03
Запись, мс	345,10 ± 16,92	314,33 ± 5,97
Общее время, мс	523,99 ± 22,75	416,86 ± 6,77

Согласно табл. 1, разработанный анализатор на операции чтения медленнее bandgnu13, тогда как операция записи осуществляется на близкой скорости и занимает в 2–3 раза больше времени, чем чтение, что приводит к тому, что общее время работы анализатора примерно на 25 % больше,

чем у bandgnu13. Наблюдаемое поведение обусловлено различной логикой работы программ: разработанный анализатор опирается на структуры объектно-ориентированного программирования, в то время как bandgnu13, написанная на C, не использует их. Также следует учитывать различия в размере блоков чтения и традиционную «медлительность» fstream, через потоки которого осуществляются чтение и запись. Однако, учитывая функциональные возможности и различия в целях и задачах данных программ, а также временные интервалы, не превышающие одной секунды даже для массивных задач, сравнительно редко встречающихся, производительность анализатора можно считать высокой и соизмеримой с программой сравнения.

Заключение

1. Кратко рассмотрены основные принципы работы научного программного обеспечения для исследования материалов методами численного квантово-механического моделирования. Отмечены особенности, присущие преимущественно коммерческому программному обеспечению, позволяющие обеспечивать эффективную обработку вычислений с последующей визуализацией. Показано, что программа bandgnu13, входящая в пакет численного квантово-механического моделирования OpenMX, фактически является простым конвертером выходных данных о зонной структуре, представленных в «сыром» виде в формат данных, пригодным для дальнейшей визуализации. Изложены требования к функциональности анализатора, который по запросу пользователя будет считывать «сырые» данные, анализировать их, обрабатывать и сохранять в удобном для последующей визуализации формате.

2. На основании рассмотренных требований реализовано кросс-платформенное CLI-приложение, написанное на языке C++. Благодаря использованию стандартной библиотеки шаблонов анализатор представляет собой компактное (размер исполняемого файла менее 100 Кбайт) монолитное решение без дополнительных библиотечных зависимостей. Проведена оценка производительности анализатора в сравнении с программой bandgnu13, показавшая, что разработанный анализатор лишь незначительно медленнее на больших данных, что связано с общей «медлительностью» файловых потоков, через которые осуществляются чтение/запись, при этом практически в любом случае время работы анализатора будет составлять десятки миллисекунд.

3. Значительно переработана поддержка системы визуализации данных Gnuplot, что дает возможность в два клика мышью визуализировать обработанные результаты расчетов. Описанный принцип работы предлагаемой программы позволит использовать данную статью как краткое руководство пользователя. Архитектура анализатора расширяет его функциональность и добавляет поддержку форматов других пакетов для квантово-механического моделирования, в первую очередь CASTEP и VASP. Также в дальнейшем планируется внедрение поддержки Matplotlib для быстрой кросс-платформенной визуализации за счет данной библиотеки.

4. Исследования поддержаны Белорусским республиканским фондом фундаментальных исследований (проект T23УЗБ-111), выполнены в рамках заданий 2.14.3 (№ госрегистрации 20212445) и 2.25 (№ госрегистрации 20240603) Государственной программы научных исследований «Материаловедение, новые материалы и технологии» на 2021–2025 годы.

Список литературы

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. Vol. 21, No 39. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>.
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. Vol. 54, No 16. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>.
3. First Principles Methods Using CASTEP / S. J. Clark [et al.] // Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials. 2005. Vol. 220, No 5–6. P. 567–570. <https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.567.65075>.
4. Chemistry with ADF / G. Te Velde [et al.] // Journal of Computational Chemistry. 2001. Vol. 22, No 9. P. 931–967. <https://doi.org/10.1002/jcc.1056>.
5. QuantumATK: An Integrated Platform of Electronic and Atomic-Scale Modelling Tools / S. Smidstrup [et al.] // Journal of Physics: Condensed Matter. 2019. Vol. 32, No 1. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab4007>.

6. Computational Materials Engineering: Recent Applications of VASP in the MedeA® Software Environment / E. Wimmer [et al.] // *Journal of the Korean Ceramic Society*. 2016. Vol. 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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155108>.
8. Ozaki, T. Numerical Atomic Basis Orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // *Physical Review B*. 2004. Vol. 69. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.195113>.
9. Ozaki, T. Efficient Projector Expansion for the ab Initio LCAO Method / T. Ozaki, H. Kino // *Physical Review B*. 2005. Vol. 72. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.045121>.
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, No 8. P. 63–67. <https://doi.org/10.35596/1729-7648-2021-19-8-63-67>.
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. <https://doi.org/10.1007/s10812-022-01438-x>.
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. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e28646>.
13. Electronic Structure of Bismuth Ferromanganite $\text{BiFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$ / A. V. Baglov [et al.] // *Semiconductors*. 2024. Vol. 58, No 13. P. 1054–1059. <https://doi.org/10.1134/S1063782624700040>.
14. Баглов, А. В. Исследование структурных и электронных свойств $\text{SmGaGe}_2\text{O}_7$ методами из первых принципов / А. В. Баглов, Л. С. Хорошко // *Неорганические материалы*. 2023. Т. 59, № 1. С. 3–9. <https://doi.org/10.31857/S0002337X23010037>.
15. Бонч-Бруевич, В. Л. Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников; 2-е изд. перераб. и доп. М.: Изд-во Наука, 1990.
16. Yu, P. Y. *Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties* / Y. P. Yu, M. Cardona; 4th Edition. Germany: Springer Ltd, 2010.
17. Raymond, E. S. *Basics of the Unix Philosophy. The Art of Unix Programming* / E. S. Raymond // Addison-Wesley Professional. 2004.

Поступила 31.03.2025

Принята в печать 28.06.2025

References

1. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., et al. (2009) Quantum ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 21 (39). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>.
2. Kresse G., Furthmüller J. (1996) Efficient Iterative Schemes for ab Initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Physical Review B*. 54 (16). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>.
3. Clark S. J., Segall M. D., Pickard C. J., Hasnip P. J., Probert M. I. J., Refson K., et al. (2005) First Principles Methods Using CASTEP. *Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials*. 220 (5–6), 567–570. <https://doi.org/10.1524/zkri.220.5.567.65075>.
4. Te Velde G., Bickelhaupt F. M., Baerends E. J., Fonseca Guerra C., Van Gisbergen S. J. A., Snijders J. G., et al. (2001) Chemistry with ADF. *Journal of Computational Chemistry*. 22 (9), 931–967. <https://doi.org/10.1002/jcc.1056>.
5. Smidstrup S., Markussen T., Vancraeyveld P., Wellendorff J., Schneider J., Gunst T., et al. (2019) QuantumATK: An Integrated Platform of Electronic and Atomic-Scale Modelling Tools. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 32 (1). <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab4007>.
6. Wimmer E., Christensen M., Eyert V., Wolf W., Reith D., Rozanska X., et al. (2016) Computational Materials Engineering: Recent Applications of VASP in the MedeA® Software Environment. *Journal of the Korean Ceramic Society*. 53 (3), 263–272. <https://doi.org/10.4191/kcers.2016.53.3.263>.
7. Ozaki T. (2003) Variationally Optimized Atomic Orbitals for Large-Scale Electronic Structures. *Physical Review B*. 67. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155108>.
8. Ozaki T., Kino H. (2004) Numerical Atomic Basis Orbitals from H to Kr. *Physical Review B*. 69. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.195113>.
9. Ozaki T., Kino H. (2005) Efficient Projector Expansion for the ab Initio LCAO Method. *Physical Review B*. 72. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.045121>.
10. Baglov A. V., Khoroshko L. S. (2021) Atom Species Energy Dependence on Magnetic Configurations in the Perovskite Yttrium Orthoferrite. *Doklady BGUIR*. 19 (8), 63–67. <https://doi.org/10.35596/1729-7648-2021-19-8-63-67>.

11. Baglov A. V., Khoroshko L. S. (2022) Crystal Structure and Electronic Properties of Rhenium Disulfide. *Journal of Applied Spectroscopy*. 89, 860–864. <https://doi.org/10.1007/s10812-022-01438-x>.
12. Baglov A., Khoroshko L., Zhoidzik A., Dong M., Weng Q., Kazi M. et al. (2024) Evolution of Structural and Electronic Properties Standardized Description in Rhenium Disulfide at the Bulk-Monolayer Transition. *Heliyon*. 10. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e28646>.
13. Baglov A. V., Khoroshko L. S., Silibin M. V., Karpinsky D. V. (2024) Electronic Structure of Bismuth Ferromanganite $\text{BiFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$. *Semiconductors*. 58 (13), 1054–1059. <https://doi.org/10.1134/S1063782624700040>.
14. Baglov A. V., Khoroshko L. S. (2023) Structural and Electronic Properties of $\text{SmGaGe}_2\text{O}_7$ Studied by First Principles Methods. *Inorganic Materials*. 59 (1), 1–7. <https://doi.org/10.1134/S002016852301003X> (in Russian).
15. Bonch-Bruevich V. L., Kalashnikov S. G. (1990) *Physics of Semiconductors*. Moscow, Nauka Publ. (in Russian).
16. Yu P. Y., Cardona M. (2010) *Fundamentals of Semiconductors. Physics and Materials Properties*. Germany, Springer Ltd Publ.
17. Raymond E. S. (2004) Basics of the Unix Philosophy. The Art of Unix Programming. *Addison-Wesley Professional*.

Received: 31 March 2025

Accepted: 28 June 2025

Вклад авторов

Баглов А. В. написал исходный код, провел отладку и тестирование разработанного программного обеспечения. Подготовил наборы входных и выходных тестовых файлов для тестирования программного обеспечения на пользовательских системах. Привел примеры использования программы. Сопровождал проект.

Хорошко Л. С. осуществила постановку задачи для разработки программного обеспечения, подготовила рукопись статьи, привела примеры и варианты использования программы, обеспечила первичное тестирование.

Authors' contribution

Baglov A. V. wrote the source code, debugged, and tested the developed software. Prepared sets of input and output test files for testing the software on user systems. Provided examples of program usage. Project maintainer.

Khoroshko L. S. formulated the problem for software development, prepared the article manuscript, provided examples and options for using the program, and provided initial testing.

Сведения об авторах

Баглов А. В., ст. науч. сотр. науч.-иссл. лаб. энергоэффективных материалов и технологий, Белорусский государственный университет; науч. сотр. Центра наноэлектроники и новых материалов, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

Хорошко Л. С., канд. физ.-мат. наук, доц., вед. науч. сотр. науч.-иссл. лаб. энергоэффективных материалов и технологий, Белорусский государственный университет; вед. науч. сотр. Центра наноэлектроники и новых материалов, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

Адрес для корреспонденции

220030, Республика Беларусь,
Минск, просп. Независимости, 4
Белорусский государственный университет
Тел.: +375 17 293-53-55
E-mail: baglov@bsu.by
Баглов Алексей Викторович

Information about the authors

Baglov A. V., Senior Researcher at the Laboratory of Energy Efficient Materials and Technologies, Belarusian State University; Researcher at the Center of Nanoelectronics and Advanced Materials, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Khoroshko L. S., Cand. Sci. (Phys. and Math.), Associate Professor, Leading Researcher at the Laboratory of Energy Efficient Materials and Technologies, Belarusian State University; Leading Researcher at the Center of Nanoelectronics and Advanced Materials, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

Address for correspondence

220030, Republic of Belarus,
Minsk, Nezavisimosti Ave., 4
Belarusian State University
Tel.: +375 17 293-53-55
E-mail: baglov@bsu.by
Baglov Aleksey Viktorovich