МРНТИ 29.19.05

КВАНТТЫҚ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛДЕУ ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫҚ ПРОЦЕСТЕРДІ ҒЫЛЫМИ ТАНЫМ ӘДІСІ РЕТІНДЕ

Г.Ә. Қаптағай, Г.Т. Тугелбаева, А.А. Дутбаева
Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан
aidana2309@mail.ru

Қазіргі таңда ғылыми-практикалық зерттеулерде компьютерлік модельдеу негізгі құралдардың бірі болып табылады. Компьютерлік модельдеу – қазіргі заманғы ғылыми танымның ең негізгі принципі. Модельдің жасалуы зерттеу мақсатына және жинақталған мәліметтердің көлеміне байланысты болады. Физикалық зерттеуде эксперименттік зерттеу әдістері кейбір мәселелерде қолжетімді емес. Мақалада физиканы оқытуда ақпараттық технологияны қолданудың тиімді бағыттарының бірі болып табылатын физикалық құбылыстар мен процестерді кванттық-химиялық модельдеу қарастырылған. Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) бұл атом масштабындағы материалдарды модельдеуге арналған компьютерлік бағдарлама.

Түйін сөздер: модель, әдіс, моделдеу, компьютерлік эксперимент, компьютерлік модель, Vienna Ab initio Simulation Package (VASP).

Заманауи жалпы білім беретін мектеп физика курсында физикалық процестерді түсіну негізі ядролық және молекулалық теория, Авогадро заңы, заттың құрылымы мен массасы сақталу заңдары, зат құрылысы теориясы негізінде құрылады. Мұнымен қоса көптеген жоғары оқу орындарында физик мамандарды дайындауда міндетті пәндердің бірі болып табылатын «Қатты денелер физикасы» пәні қатты денелердің физика-механикалық, химиялық, электрондық қасиеттерін тереңінен түсінуге мүмкіндік береді.

Заттың құрылысы туралы түсініктерді қалыптастыру - физиканы оқыту әдістемесіндегі маңызды міндеттердің бірі. "Модель" сөзі латын тілінен "модуль" (өлшем, қадам, ритм, шама) сөзінен шыққан және "модус" сөзімен байланысты (көшірме, бейне). В.А. Штофф бұл терминнің тамыры М.В. Поллионның көркем құрылыс бойынша жұмыстарынан шығады; ортағасырлық дәуірде концептуалды модель ғимараттың барлық пропорциялары көрсетілген масштабты (колонна диаметрінің жартысын) көрсетті [1; 150]. Одан әрі ол өнерде жасалған жасампаздықтар өлшемінің эталоны болды. Үлгі ретінде, әдетте, өлшемдері басқа, объектіге ұқсас заттың кішірейтілген көшірмесін береді. Кейіннен модель ұғымы қандай да бір құбылыстарды тікелей зерттеу мүмкін болмаған немесе тиімсіз болған кезде ғылыми зерттеулерде қолданыла бастады. Бұл жағдайда зерттелетін объект басқа, неғұрлым қарапайым және зерттеу үшін қол жетімді және түпнұсқаға сәйкес келеді.

Бұл нысан зерттелетін нысанның моделі деп аталады. Концептуалдық модельдің бірнеше анықтамаларын берейік: "Модель ретінде зерттеу объектісін көрсете немесе жаңғырта отырып, оны зерттегенде осы объект туралы жаңа ақпарат беретіндей етіп ауыстыруға қабілетті ойша ұсынылған немесе қаржылық іске асырылған жүйе деп түсініледіұғынылады" [2; 108]. "Модель белгілі бір саладағы фактілерді, заттарды және қарым-қатынастарды қандай да бір саланың неғұрлым қарапайым, неғұрлым көрнекті материалдық құрылымы түрінде бейнелейді" [3; 283]. Модель, сурет (шартты немесе ментальды - суретті, сипаттауды, схеманы, сызбаны, кестені, жоспарды, картаны және т.б. қоса алғанда) немесе прототип (үлгіні) және кез келген "объект немесе объектілер жүйесі (осы модельдің"түпнұсқасы") белгілі бір жағдайларда "орынбасушы" немесе "өкіл" ретінде пайдаланылды [4; 50].

В.А. Штоффтың "Кванттық механикадағы модельдердің рөлі туралы мақаласында "... бізге белгілі басқа құбылыстармен ұқсастығы негізінде санада қалыптасқан, тікелей ойлауға болмайтын субъектінің айқын идеясы модель... деп аталады... " [3; 287].

Әдебиетте кез келген көрініс модель болып табылатын көзқарасты табуға болады. "Психологиялық емес, гносеологиялық, ақпараттық мағынада" түсінігі "модельдік ұсыныс" болып табылады. В.П. Бранский бойынша түсінік — бұл "семантикалық модел... құбылыстардан нысанның дәл бейнесін береді" [2; 109]. Екінші жағынан, кейбір авторлар (А.А. Зиновьев, И.И. Резвин [3; 287] және Ю.А. Жданов [4; 50]) модельдер тек материалдық және атаулы болуы мүмкін деп санайды. Ұсыным материалдық субъект те, белгі жүйесі де емес сондықтан, мәні бойынша, ұсыным модель ретінде болмайды деп тұжырымдалады. Модель мен модельдеуші объект арасындағы сәйкестік: модель құрылымы мен түпнұсқаның жеке элементтерінің сәйкес келуі деңгейінде, функционалдық байланыстың олардың сипаттамасы бойынша сәйкес келуі деңгейінде, модель элементтері мен зерттеу объектісінің элементтері арасындағы қарым-қатынас ұқсас деңгейінде болып әртүрлі деңгейлерде болуы мүмкін.

Осылайша, аталған жағдайларда модель теорияда орындалуы тиіс функциялар үшін немесе теорияны құру үшін қолданылады.

Физикалық зерттеудің маңызды әдістерінің бірі модельдеу әдісі болып табылады. Бірақ бұл әдіске физиканы оқытуда жеткілікті назар аударылмайды, бұл оның модел бойынша объектіні сәйкестендіруге әкеледі [5; 72].

Қазіргі уақытта компьютерлік моделдеу әдістері жылдамдығы, бағасының арзандығы мен тікелей эксперименттік бақылауға қолжетімді емес процестер үшін нақтылау қабілетіне байланысты кеңінен танылуда.

Кванттық зерттеу әдістері

Эксперименттік зерттеу әдістері материалдардың атом құрылымының кейбір қасиеттерін және ерекшеліктерін анықтау үшін әрқашан қолжетімді емес. Бұл жағдайларда сандық модельдеу, соның ішінде "алғашқы принциптерді *(Ab initio)* " пайдалана отырып, процестерді терең түсінуге есептеу әдістері айтарлықтай көмектеседі. *Ab initio* әдістері мен есептеу тәсілдеріне қысқаша шолу беру болып табылады, олар қазіргі уақытта кванттық-механикалық әдістермен көпатомды жүйелердің физика-химиялық қасиеттерін есептеу үшін пайдаланылады. Ab initio термині "алғашқы қағидалар" дегенді білдіреді, ғылыми әдебиетте мұндай есептеу әдістерн эмпирикалық емес деп те атайды.

Кез-келген эмпирикалық емес әдістің міндеті белгілі бір дәлдікпен химиялық құрамы мен атомдардың белгілі координаттары бар, қандай да болмасын шекаралық параметрлерін пайдаланбай, эксперимент негізінде алынған іргелі тұрақтылар арқылы заттар қасиеттерін сипаттау болып табылады.

Зерттелетін объектінің электрондық құрылымына кванттық-механикалық есептеулерді қолдану үшін гамильтониан қолданылу керек. Басқаша айтқанда, қандай әсер ескерілуі тиіс және қандай түрде екенін анықтау қажет. Көп жағдайда релятивистік емес гамильтонианды қарастыруымен шектеледі, ол кинетикалық қуат, электрондардың ядроларымен және бір-бірімен кулондық өзара әсерлесуі, сондай-ақ ядролардың электростатикалық өзара әсерлесуін қамтиды.

Релятивистік әсерлерді ескеру атомдар үшін маңызды. Оларды қарастыру үшін гамильтонианға спин-орбитальды әсерлесуді ескеретін шама қосылуы керек.

Электрондық құрылым жүйесі туралы барлық қажетті ақпарат, статикалық және динамикалық гамильтониан түрі мен электрондар санын қамтиды. Бұл қарастырылып отырған жүйе электрлік бейтарап екенін ескеру қажет, яғни элементар ұяшыққа жиынтық ядролық заряд тиесілі болып келеді.

Әдетте, қатты дене физикасында электрондық жүйенің негізгі негізгі күйін анықтау маңызды. Осылайша, электрондық жүйенің негізгі күйі және онымен байланысты физикалық-химиялық қасиеттерін анықтау ең негізгі зерттеу нысаны.

Жүйенің негізгі күйін анықтау үшін Шредингер теңдеуін шешу қажет және энергиясын табу керек, негізгі күйге ядролардың осы конфигурациясының ең төменгі мәні сәйкес келеді. Дегенмен, біздің білетініміздей, жалпы түрде көпэлектронды жүйе үшін теңдеуді шешу мүмкін емес, сондықтан оны шешу үшін көпэлектронды есепті бір электрондыға алмастырады.

Кванттық физика - басқа да физика-химиялық әдістерімен қатар, теоретиктер, химик-эксперименторлар қолында ғана емес, сондай-ақ биологтардың қолында молекулалардың қасиеттері мен реакциялық қабілетін, құрылыстарды зерттеудің тиімді құралы. Қазіргі заманғы кванттық химия әдістері

молекулалардың әр түрлі физика-химиялық қасиеттерін сипаттауға мүмкіндік береді, газ фазасындағы молекулалардың электрондық, кеңістіктік құрылысы және де қатты денелердің, негізінен эксперименттік әдістерінің деректерімен салыстырмалы дәлдікпен, күйін сипаттауға да мүмкіндік береді. Кванттық-химиялық есептеу әдістерінің мүмкіндіктерін пайдалану кейде қолжетімді емес немесе эксперименттік зерттеулер үшін қиындық туғызатын (мысалы, өтпелі жағдайлар туралы деректер) сипаттамаларын алуға мүмкіндік береді. Заманауи компьютерлік техниканың күрт дамуы нәтижесінде, сондай-ақ кванттық-химиялық әдістері және алгоритмдердің айтарлықтай есептеуін жетілдіру барысында қазіргі кванттық құрылымдарды, олардың құрылысы мен қасиеттерін алдын ала болжауға, жаңа әсерлерді сипаттауға қабілетті.

Қазіргі кезде қолданылатын квантты-химиялық зерттеу әдістерінің бірі электронның тығыздық функционалы теориясына (ТФТ, DFT (Density functional theory [6; 5648])) құрайды, ол қосылыстар орнықтылығын, олардың электрондық құрылымын, химиялық байланыстардың сипатын зерттеуге, әртүрлі реакциялардың өтуі үшін активациялық кедергілерді анықтау, фазалық ауысуын алуға, термодинамикалық сипаттамаларын жоғары дәлдікпен анықтайды. Сондай-ақ, кванттық химияның бұл әдістері эксперименттік деректерді түсіндіріп қана емес жаңа материалдардың қасиеттерін болжауға мүмкіндік береді.

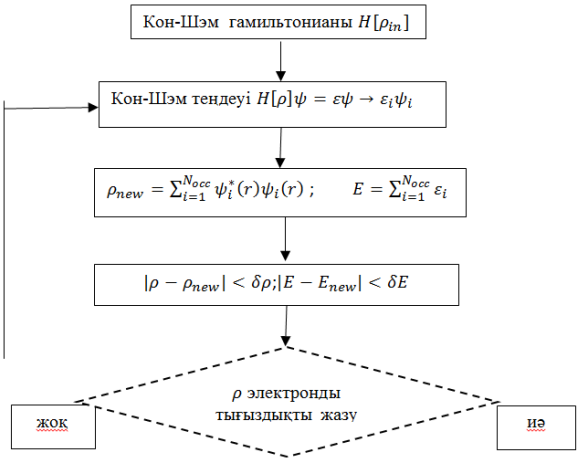
Әртүрлі материалдардың физикалық, химиялық қасиеттерін зерттеуде квантты –химиялық зерттеуді функционалды тығыздық теориясы аясында іске асыратын компьютерлік бағдарламалар ішінде тиімділерінің бірі VASP 5.3.3 (Vienna Ab-Initio Simulation Package) бағдарламалық кешені – алғашқы қағидалар негізінде атом жүйелерін есептейтін VASP 5.3.3 (Vienna Ab-Initio Simulation Package және моделдейтін әмбебап коммерциялық бағдарлама [7; 56]. Аталған бағдарламалық кешен электрондық құрылымды есептеуге мүмкіндік береді және көптеген әртүрлі физикалық-химиялық параметрлерді анықтайды. Онда бір электронды толқындық функцияларды жазық толқындармен, Вандербильт псевдопотенциалдары арқылы немесе қосылған толқындар проекциялау әдісімен (PAW) сипатталады [8; 666].

Есептеу үшін VASP келесідей 4 файлды кіріс деректері ретінде қолданады:

- файл POTCAR: есептеуде пайдаланылатын бөлшектердің (атом, ион) потенциалы/функционалы туралы ақпаратты қамтиды, файл псевдопотенциалдардың дайын қорынан алынады;
- файл POSCAR: жүйенің бастапқы геометриясы туралы ақпаратты қамтиды;
- файл KPOINTS: k-кеңістікте нүктелердің бөліну туралы ақпаратын қамтиды;
- файл INCAR: есептеу параметрлері болады.

Барлық 4 файл дайындалғаннан кейін оларды бір папкаға орналастыру керек, ол үшін VASP жұмыстық ортасы бар, яғни осы папкада уақытша деректер құрылады, сондай-ақ шығыс файлдар болады. VASP бір процессорда (дәйекті нұсқа) әрекет етеді, сондай-ақ бірнеше тораптарда (параллель нұсқа) да болады. Егер есептеу бір процессорда жүргізілетін болса, онда VASP-қа компиляцияланған файлды орындау жеткілікті,шығыс және кіріс деректер жұмыстық папкада орналасады. Бірнеше кластердегі есептеуді параллельдеу үшін MPI (Message Passing Interface) бағдарламаны қосумен басқарылатын команданы міндетті түрде қолдану керек.

Тығыздық функционалдары теориясы әдісін қолданудың блок-сұлбасы 1 суретте көрсетілген.



1- сурет – Тығыздық функционалы теориясы арқылы есептеу алгоритмінің блок-сұлбасы [7; 56]

Нөлдік емес температурада металдарды зерттеу кезінде атомдардың жылу тербелісімен жүйенің еркін энергиясы толық энергияға E_{tot} айналуын ескеру керек. Fqh еркін энергия кристалдың бұл модельінде тор динамикасының квази-гармоникалық жуықтау тәсілі арқылы есептеледі.

$F_{qh} = E_0 + F_{vib}$(1)

Негізгі күй энергиясы E_0 тербелмелі энергияға үлес қосады,

$F_{vib} = \frac{1}{2}\sum_j \hbar\,\omega_j + kT\sum_j ln\left[\frac{\hbar\,\omega_j}{kT}\right]$ (2)

Мұндағы, сызықты жылулық ұлғаю кезіндегі және тұрақты тордың тепе-теңдік пен көлемдік серпімділік модулі ω_j кристалл тербелісінің j-шы жиілігі.

Квази гармоникалық жуықтауда кристалдың еркін энергиясы гармоникалық жуықтаумен бірдей түрде болады, бірақ тұрақты көлемде құрылымдық параметрлері температурасына байланысты. Бұл тәуелділік жүйенің еркін энергиясын есептеу кезінде анықталады. Белгіленген температурада P, *P(V)* күй теңдеуін алу үшін $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ өрнекті пайдаланады.

Жылулық ұлғаю коэффициенті α келесідей анықталады

$\alpha(T) = \frac{1}{V}\frac{dV}{dT}$, (3)

Тұрақты көлем мен қысымда жалусыйымдылық (1) теңдеуден анықталды

$C_v = -T(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2})_V$(4)

$C_p = C_v + \alpha^2 BVT$(5)

мұндағы *α, V* және *B* сәйкесінше есептегіш коэффициенттері болып табылады

Бұл зерттеуде жоғары температурада және қысымда темірді зерттеуде пайдаланатын есептеу нәтижелерін көрсетеді. T = 0 K кезінде жалпы энергия мен жүйенің күй теңдеуін жоғары дәлдікпен есептеуге мүмкіндік береді.

Компьютерлік есептеулердегі параметрлерді таңдау

Бұдан ары тығыздық функционалы теориясы негізінде кванттық жүйелердің физикалық қасиеттерін зерттеу мен моделдеуді көрсету мақсатында 8 атомдық элементар ұяшықтан тұратын 16 атомды бастапқы темір құрылымының кейбір физикалық сипаттамаларын есептеу нәтижелері келтіріледі. Яғни темірдің электрондық құрылымын есептеу және тор динамикасын зерттеу *ab-initio әдісі,* псевдопотенциал, яғни, локалді электрондар тығыздығын (LDA) жуықтау және градиентік жуықтау (GGA) алмасу-корреляциялық әлеуеті потенциалы негізді VASP 5.3.3 бағдарламалық кешені арқылы іске асырылды.

Ab-initio есептеулері жазық толқындар негізінде орындалды. электрондық құрылымын есептеу және тор динамикасы әдісі *ab-initio* псевдопотенциалы, яғни, жергілікті электрондардың тығыздығын (LDA)

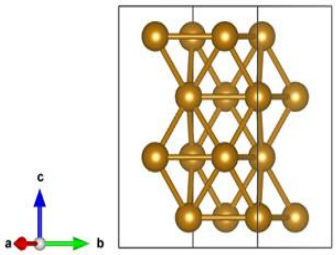
жуықтау және градиентін жақындату (GGA) қарастырылады алмасу-корреляциялық әлеуеті VASP 5.3.3 бағдарламалық пакеті арқылы орындалды.

1 – кесте. Есептеулер жүргізу барысындағы тор параметрлері

Атом	***a* (Å)**	***c* (Å)**	**V, A^3**
Fe	4.24847	6.76044	105.63

2 – кесте. Темір құрылымындағы атомдар координаты

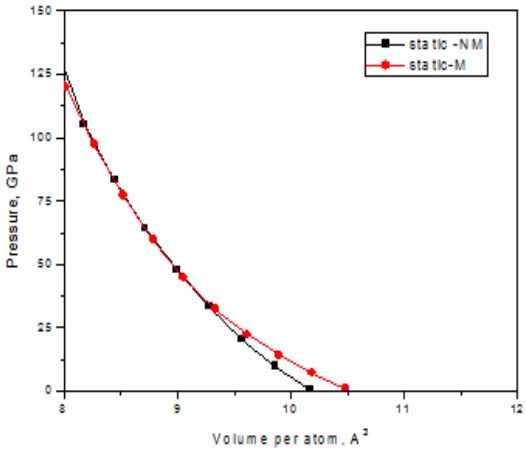
Атомдар	**X**	**Y**	**z**
Fe1	0.16665	0.83335	0.12500
Fe2	0.33335	0.66665	0.37500
Fe3	0.16665	0.83335	0.62500
Fe4	0.33335	0.66665	0.87500
Fe5	0.66665	0.33335	0.12500
Fe6	0.83335	0.16665	0.37500
Fe7	0.66665	0.33335	0.62500
Fe8	0.83335	0.16665	0.87500
Fe9	0.66665	0.83335	0.12500
Fe10	0.83335	0.66665	0.37500
Fe11	0.66665	0.83335	0.62500
Fe12	0.83335	0.66665	0.87500
Fe13	0.16665	0.33335	0.12500
Fe14	0.33335	0.16665	0.37500
Fe15	0.16665	0.33335	0.62500
Fe16	0.33335	0.16665	0.87352



2- сурет – Есептеулерде қолданылған hcp – құрылымды темірдің схемалық көрінісі

Жоғарғы температура мен қысым жағдайындағы темірдің фазалық диаграммасы

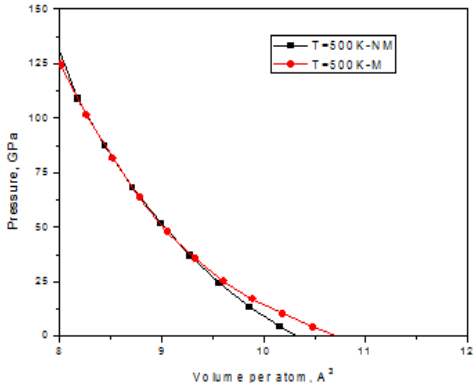
Барлық кезеңдерін бірізділікті термодинамикалық сипаттамасы әлі эксперименттік деректер ауқымы шектеулі негізде жүзеге асырылған немесе әлі іске асырылған жоқ, дегенмен темірдің фазалық диаграммасы мұқият анықталған. Темір bcc- қалыпты қысымда 1170 К температурада fcc-құрылымды. 3 суретте темірдің hcp –құрылымындағы Т=0 К температурадағы ұяшықтар көлемінің магниттік және магниттік емес фазалардағы қысымға тәуелділігі



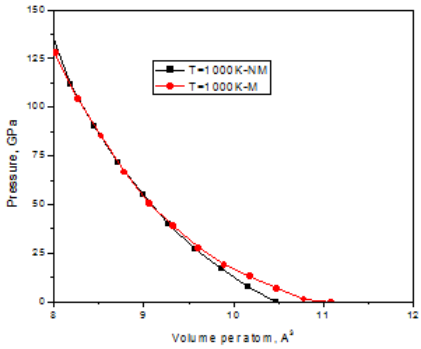
3- сурет – Темірдің hcp –құрылымындағы T=0 К температурадағы ұяшықтар көлемінің магниттік және магниттік емес фазалардағы қысымға тәуелділігі

Жер жоғары қысымда тұрақты темір құрылымы - hcp үлгіленген болса. T = 0 К (4-сурет) темір hcp-құрылымына магниттік және магнитті емес фазаларда ұяшық көлемінің қысымға тәуелділігі есептелген. Есептеулер темір hcp- құрылымында екі фазада 125 ГПа қысым тұрақты болатындығын көрсетеді.

500 К температурада магниттік және магниттік емес темір hcp- фазалық құрылымы үшін ұяшық көлемінің қысымға тәуелділігі, 1000 К 2000 К, 3000 К үшін жасалған және ол 4,5 – суреттерде көрсетілген.



4-сурет – Темірдің hcp –құрылымындағы T=500 К температурасындағы ұяшық көлемінің магниттік және магниттік емес фазалардағы қысымға тәуелділігі



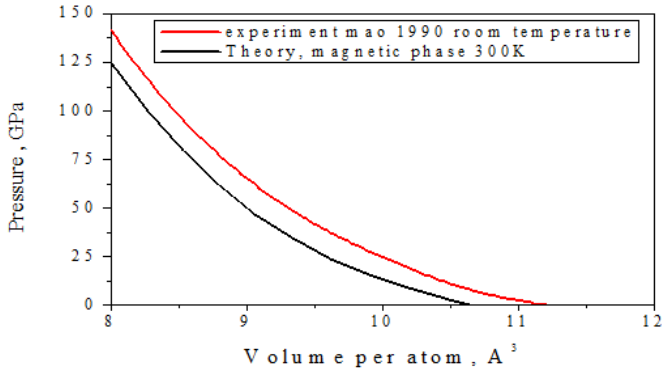
5-сурет – Темірдің hcp –құрылымындағы T=1000 К температурасындағы ұяшық көлемінің магниттік және магниттік емес фазалардағы қысымға тәуелділігі

Есептеулерден көріп отырғанымыздай температура T = 500 K екі жағдайда магнит моменті статистикалық есептеулерде өте әр түрлі. Магниттік момент 1000 K температурада 150 ГПа қысымда темірдің hcp- құрылымы сақталады.

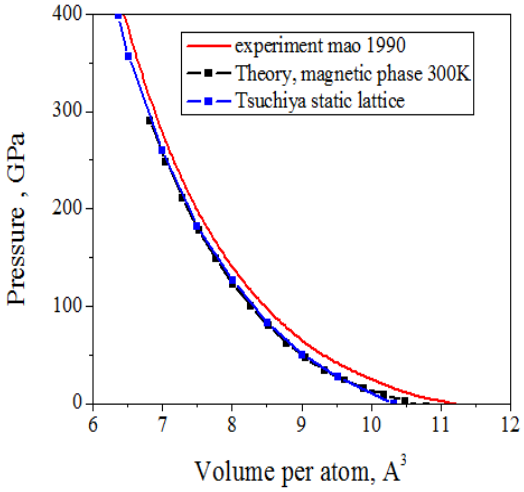
Сондай-ақ, статистикалық есептеулер (сурет 6) түрлі температурада бағаланады деректермен салыстырғанда бір диаграммада изотермасынан ұсынылған.

Бөлме температурасында 300 K температурада темірдің күй теңдеуін *ab initio* әдісімен есептеу нәтижелері эксперименттік деректермен жақсы сәйкестікте.

Бөлме температурасында эксперименттік деректер, өсіп қысым жасуша көлемінің төмендеуін көрсетеді, бұл антиферромагнитті hcp -Fe (сурет 7) құрылымын көрсетуі мүмкін. 2000 K температурада магниттік емес фаза жылжыту үшін орнатылған Бұл сондай-ақ арттыру температура (сурет 8) магнит қасиеттерін жоғалтады магниттік фазалардың әдеттегідей сипаттамасына сай келеді.

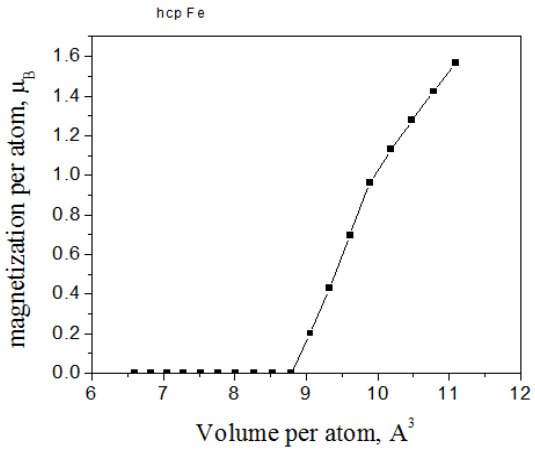


6- сурет - Бөлме температурасында темір теңдеуінің тәжірибелік есептеулерін біздің *ab initio* әдісінің есептеулерімен салыстыру



7-сурет - Магниттік фазада, T=300K температурасында және авторлардың әдебиеттеріндегі [8; 670] T=0 K үшін темір теңдеуінің тәжірибелік есептеулерін біздің *ab initio* әдісінің есептеулерімен салыстыру

8- сурет - Магниттік емес фазада, T=300K температурасында және авторлардың әдебиеттеріндегі [9; 237] T=0 K үшін темір теңдеуінің тәжірибелік есептеулерін біздің *ab initio* әдісінің есептеулерімен салыстыру



8- сурет - Магнит моментінің ұяшық көлеміне тәуелділігі

Темір атомдарының магнит моментінің күрт азаюы мен жойылу нүктесі анықталды. Бұл кейбір магнит моментінің өзгерістері зерттелген құрылымдардың бірлік ұяшық көлемінің өзгерісімен қатар орындалатындығы анықталды. Есептелген теңдеу параметрлері темір магнит моментінің күрт өзгерістері ұяшық көлемінің өзгеруінен көрініс табады. Ең айқын өзгерістер магнит моментінің өзгеруіне байланысты. Ең айқын көлем өзгерісі магнит моментінің азаю аймағына сәйкес келеді.

Қорытынды

1. Темірдің гексагональді фазасының магниттік реттелуді ескерген және ескермеген жағдайдағы күй теңдеуі есептелінді.

2. Қысымның шамасы артқан сайын магниттік реттелу біртіндеп жойылып темір магниттік қасиетінен арылады.

3. Темірдің күй теңдеуіне қысымның төменгі мәнінде магниттік реттелудің әсері едәуір болатыны байқалды. Алынған нәтижелер эксперимент нәтижелерімен салыстырылды.

Пайдаланылған әдебиеттер

1. Батороев К. Б. (1981) Аналогии и модели в познании. Москва.
2. Бранский В. П. (1999) Философское значение "проблемы наглядности в современной физике". Москва.
3. Бугаев А. И. (1981) Методика преподавания физики в средней школе: пособие для учащихся пед.ин-тов физ. - мат. спец. М.: Образование.
4. Ирхин Ю. П. (1981) в Сб.: Электронная структура и физические свойства редких земель и актинидов, УНЦ, Свердловск.
5. Володарская И. А., Митина А. М. (1989) Проблема целей обучения в современной педагогике. М.: Издательство МГУ.
6. Becke A. D. (1993) Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys. 98, 5648
7. Kresse G., Hafner J. (2007) VASP the Guide, University of Vienna. http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/
8. Литасов К. Д., Шарыгин И. С., Шацкий А. Ф., Гаврюшкин П. Н., Дорогокупец П. И., Соколова Т. С., Отани Э., Дымшиц А. М., Алифирова Т. А. (2013) P-V-T-уравнения состояния карбидов железа Fe3C и Fe7C3и их соотношения в условиях мантии и ядра Земли // ДАН.
9. Соколова Т. С., Дорогокупец П. И., Литасов К. Д. (2013) Взаимосогласованные шкалы давлений на основании уравнений состояния рубина, алмаза, MgO, B2-NaCl, а также Au, Pt и других металлов до 4 Мбар и 3000 К // Геология и геофизика.

Квантово-химическое моделирование как метод научного познания физико-химических процессов

Г.Ә. Қаптағай, Г.Т. Тугелбаева, А.А. Дутбаева
Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан
e-mail: aidana2309@mail.ru

В настоящее время компьютерное моделирование является одним из ключевых инструментов в научных и практических исследованиях. Компьютерное моделирование является важнейшим принципом современных научных знаний. Разработка модели зависит от цели исследования и количества собранных данных. В физических исследованиях экспериментальные методы не доступны в некоторых аспектах.
В статье рассматривается квантово-химическое моделирование физических явлений и процессов, являющееся наиболее перспективным направлением использования информационных технологий в физическом образовании. Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) это компьютерная программа для моделирования материалов атомного масштаба.

***Ключевые слова*:** модель, метод, моделирование, компьютерный эксперимент, компьютерный модель, Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)

Quantum chemical modeling as a method of scientific cognition of physical and chemical processes

G.A. Kaptagay, G.T. Tugelbayeva, A.A. Dutbayeva
Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan
e-mail: aidana2309@mail.ru

Currently, computer modeling is one of the key tools in scientific and practical research. Computer modeling is an essential principle of modern scientific knowledge. Model development depends on the purpose of the study and the amount of data collected. In physical studies, experimental methods are not available in some aspects. The article presents quantum-chemical simulation of physical phenomena and processes, which represent the most promising direction of using information technology in physical education. The Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) is a computer program for atomic scale materials modelling.

Keywords: model, method, simulation, computer experiment, computer model, The Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)

Редакцияға 04.02.2020 түсті.