

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Промышленная электроника: Учебник для ВУЗов. Горбачев Г.Н., Чаплыгин Е. Е. Энергоатомиздат 1988.
2. В. Г. Гусев, Ю. М. Гусев. Электроника и микропроцессорная техника. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.:Высш. шк., 2005. – 790 с.

### РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ РАСЧЕТА ГЕОМЕТРИИ АТОМНЫХ СТРУКТУР

А.А. Золотарев, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [art707@tpu.ru](mailto:art707@tpu.ru)

Для синтеза новых материалов с заданными свойствами необходимо знать их структурные особенности, основные свойства и характеристики. Применение компьютерного моделирования и численных методов расчета позволяет получить большое количество данных об атомной структуре и свойствах материалов перед проведением экспериментальных исследований.

Для компьютерного моделирования и расчета свойств молекул методом Хартри-Фока-Рутаана необходимо знать координаты каждого атома в декартовом пространстве. Вследствие этого ведется разработка программного обеспечения формирующего координаты атомов в молекуле на основе структурной формулы молекулы методами молекулярной механики и оптимизации ее геометрии.

Метод молекулярной механики позволяет находить геометрические характеристики и энергии многоатомных систем. В рамках метода молекулярной механики полная энергия исследуемой структуры представляет собой сумму энергетических термов: энергия химического взаимодействия, энергия валентных углов, энергия торсионного взаимодействия, энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия, энергия электростатического взаимодействия. В основе метода молекулярной механики лежит следующая математическая модель: атомы представляются в виде шаров, связанных между собой пружинами или стержнями. Энергии длин связей и валентных углов описываются законом Гука [1].

Оптимизация молекулярной геометрии позволяет изучить структуру молекулы и ее энергию в свободном состоянии. Суть оптимизации геометрии заключается в повторном (многократном) вычислении энергии молекулы и вариации структурных параметров так, чтобы достичь структуру, соответствующей минимуму полной энергии молекулы. Вариация обычно включает в себя первоначальный расчет энергии при начальной структуре, оценку градиента энергии, выбор новых структурных параметров на основе информации о градиенте, и проверку выполнения условий прекращения процесса оптимизации [2].

В результате было разработано программное обеспечение, которое формирует структурную формулу молекулы, проверяет ее на корректность, устанавливает начальные координаты атомов в молекуле и проводит оптимизацию начальной геометрии. Полученные координаты атомов являются исходными данными для расчетов методом Хартри-Фока-Рутаана.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. – Нижний Новгород: ННГУ, 2007 – 84 с.
2. Блатов В.А. Полуэмпирические методы квантовой химии. – Самара.: Универс-групп, 2005 – 32 с.