

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.

РАЗРАБОТКА АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ ПРОЦЕССОМ ПОЛУЧЕНИЯ КАЛЬЦИТОАНГИДРИТА

Е.С. Китаева, А.А. Денисевич

Томский политехнический университет, 63405, Россия, г. Томск,

пр. Ленина, 30, e-mail:esk15@tpu.ru

Цель работы состоит в возможности использования отходов производства и потребления.

В настоящее время производство на предприятиях металлургической и энергетической промышленности сопровождается выбросами в атмосферу серосодержащих газов. Разработаны технологии по обезвреживанию и получению различных строительных материалов из этих газов, а при переработке серосодержащих газов образуется концентрированная серная кислота.

Для добычи руды приходится закупать строительный гипс для заполнения пустот в пластах почвы, после извлечения руды.

В результате химического взаимодействия по уравнению (1) образуется безводный твердый сульфат кальция, названный кальцитоангидритом (КА), газообразные углекислый газ и вода.



КА может выступать заменой строительному гипсу [1].

Участвующий в реакции известняк с содержанием CaCO_3 86,5 % должен подаваться с избытком в количестве 50 % относительно стехиометрически необходимого при температуре реакции выше 100 °С (от 105 до 150 °С).

Рассмотрены методы дозирования расхода известняка.

- Объемный метод дозирования
- Весовой метод дозирования
- Дозирование с коррекцией по заданному параметру [2].

В результате проделанной работы разработано математическое описание дозирования сыпучего вещества шнековым питателем и произведено компьютерное моделирование.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ю.М. Федорчук Закон энергосбережения – вовлечение в круговорот энергетических и материальных вторичных ресурсов. г. Томск [электронный ресурс]: <http://www.lib.tpu.ru/fulltext/v/Conferences/2010/K02/4059.pdf>
2. Рогинский Г.А. Дозирование сыпучих материалов. – М.: Химия, 1978.- 167 с.

«УМНЫЙ ЗАМОК» НА ОСНОВЕ ARDUINO UNO

Р.А. Кондратенко, М.А. Гуляев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: roman.kondratenko.1996@mail.ru

Для того, чтобы обезопасить помещение от проникновения, было решено разработать устройство, которое будет оповещать охранный пункт по SMS сообщению о том, что помещение закрыто или открыто. В случае если дверь открыта, приходит SMS оповещение о том, что требуется закрыть дверь.

Это изобретение сделает производственный процесс более безопасным. Данный гаджет не будет таким затратным, как другие приборы охранного типа.

Разработанное устройство представляет собой образец, который состоит из следующих компонентов: плата Arduino Uno ^[1], GSM-модуль GPRS-shield (SIM900R) ^[2]. Программа написана в среде Arduino IDE ^[3], в которой реализовано получение SMS – оповещение.

В качестве объекта разработки был выбран «Умный замок» ^[4]. Устройство позволяет осуществлять охранный контроль помещения на основе получения информации от электрической кнопки, встроенного в замочную скважину. При срабатывании кнопки сигнал подаётся на GPRS модуль, а модуль соответственно отправляет SMS сообщения на охранный пункт. Питание производится как от NiMH-аккумулятора «Крона»^[5], так и от сети с помощью импульсного блока питания с USB-разъёмом^[6].

В ходе выполнения проекта была проведена работа с Arduino и с GPRS Shield, которая реализовала устройство «Умный замок». Мы произвели сборку и демонстрацию нашего гаджета. Наше устройство станет незаменимой вещью, которая обезопасит любое помещение.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Arduino Uno. [Электронный ресурс].- Режим доступа <http://amperka.ru/product/arduino-uno> – 12.04.16
2. GPRS Shield. [Электронный ресурс].- Режим доступа: <http://amperka.ru/product/arduino-gprs-shield> – 12.04.16
3. Arduino IDE. [Электронный ресурс].- Режим доступа: <https://www.arduino.cc/en/Main/Software> – 12.04.16
4. «Умный замок ». [Электронный ресурс].- Режим доступа: <http://www.techlicious.com/guide/5-futuristic-smart-locks-for-your-home/> – 11.04.16
5. NiMH-аккумулятор «Крона». [Электронный ресурс].- Режим доступа: <http://amperka.ru/product/nimh-krona-battery> – 12.04.16