

Киреева Е.Д.

*Научный руководитель: старший преподаватель Е.В. Шарпова
Муромский институт (филиал) федерального государственного образовательного
учреждения высшего образования «Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
602264, г. Муром, Владимирская обл., ул. Орловская, 23
E-mail: kireeva.ekaterina.08@mail.ru*

Молекулярное моделирование в компьютерных системах

Большой прогресс в разработке и использовании квантово-химических методов, развитие вычислительной техники и программного обеспечения привели к широкому применению методов компьютерного моделирования различных молекулярных систем в научной и учебной деятельности.

Благодаря современным методам молекулярного моделирования появилась возможность изучать и прогнозировать свойства, электронное и пространственное строение молекулярных систем с точностью, сравнимой с данными экспериментальных методов, и рассчитывать параметры молекул, труднодоступных для экспериментального изучения.

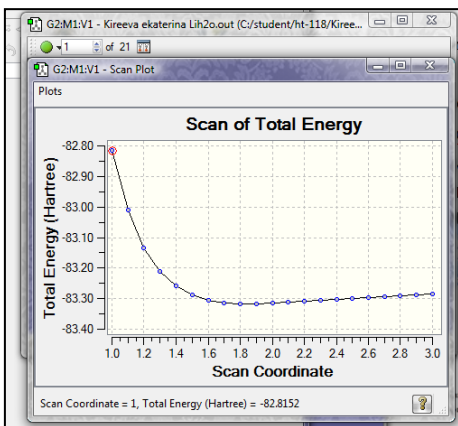
С развитием и распространением компьютерных технологий, а также, с развитием методов квантовой химии, за последнее время было разработано большое количество программ для моделирования молекулярных систем. Использование современных технологий позволяет создавать как объекты, имеющие существенно новые качества и позволяющие осуществлять их объединение в полноценно функционирующие системы, так и материалы, состоящие из наноразмерных частиц и обладающие новыми свойствами, которые в последствии будут введены в эксплуатацию. Так же современная техника позволяет провести квантово-химические исследования за относительно небольшой промежуток времени.

Все программные комплексы для квантово-химических расчетов характеризуются собственным набором особенностей и эксплуатационных возможностей. Отличительной чертой в этих программах является использование различных математических методов в реализации основных алгоритмов, ориентированность на определенную вычислительную платформу, различная интерпретация результатов вычисления и графических интерфейсов. Доступным для пользователей стали многоцелевые квантово-химические программы «GAUSSIAN» и «GaussView».

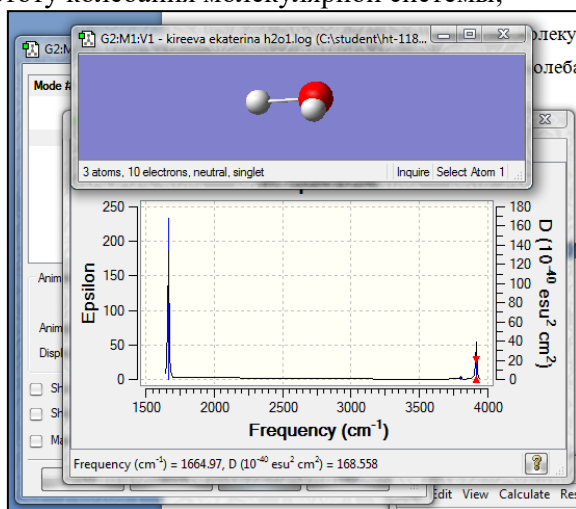
Программа «GAUSSIAN» является программным пакетом для расчета структуры и свойств молекулярных систем газофазном и конденсированном состоянии, включающий большое разнообразие методов вычислительной химии, квантовой химии и молекулярного моделирования. Данный программный пакет «GAUSSIAN» был создан в 1970 году нобелевским лауреатом Джоном Поплом и его исследовательской группой и с тех пор постоянно обновляется. Программные пакеты серии «GAUSSIAN» считаются специалистами одними из самых мощных в плане предоставляемых возможностей и распространенных в повседневном использовании.

Программа «GAUSSIAN» выполняет следующие функции:

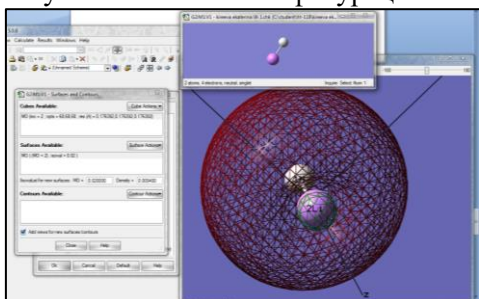
- Рассчитывает энергию молекулярной системы;



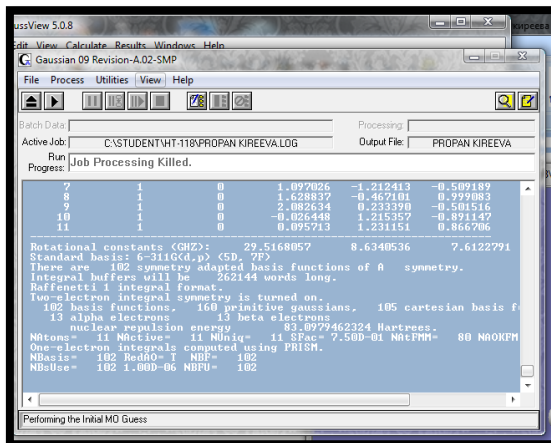
- Рассчитывает частоту колебания молекулярной системы;



- Рассчитывает электронную плотность и конфигурацию системы ;



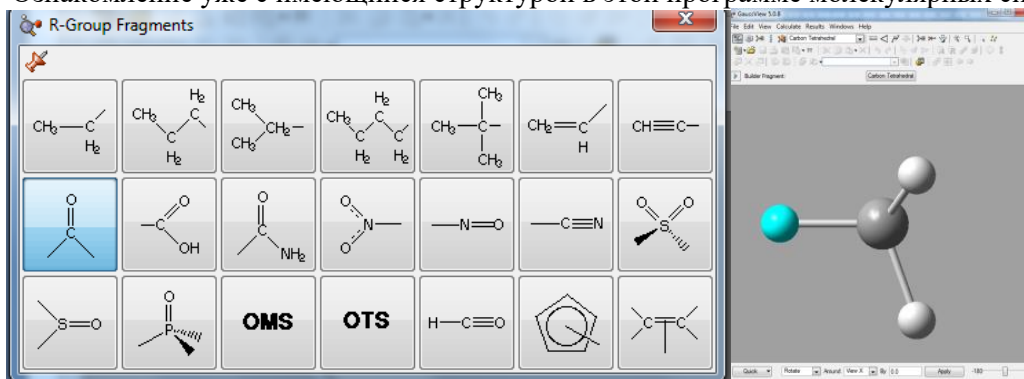
- Производит оптимизацию молекулярной системы .



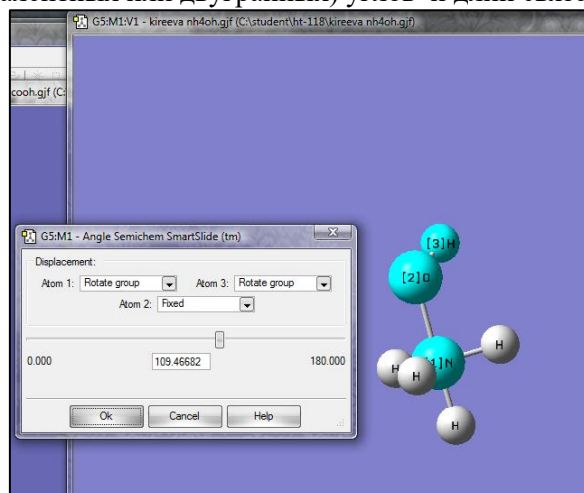
Программа «GaussView»- это программа, которая является стандартным средством интерпретации результатов квантово-химических расчетов, выполненных в программе «GAUSSIAN», позволяющая получить графическое изображение молекулярных структур, а также осуществляющая визуализацию вращения выходных файлов и облегчающая формирование входных файлов.

Программа «GaussView» выполняет следующие действия:

- Ознакомление уже с имеющейся структурой в этой программе молекулярных систем;



- Непосредственное построение структуры молекулярных систем;
- Модификация (валентных или двугранных) углов и длин связей в системах;



- Графически позволяет изучить изменение энергии системы, в результате ее оптимизации.

Kireeva Ekaterina group HT-118	
File Name	INPUT (KIREEVA)
File Type	Jog
Calculation Type	SP
Calculation Method	RHF
Basis Set	3-21G
Charge	0
Spin	Singlet
E(RHF)	-99.45619777 a.u.
RMS Gradient Norm	a.u.
Imaginary Freq	
Dipole Moment	2.1187 Debye
Point Group	C _v
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 3.0 seconds.	

Atomic Charges	
Type:	Mulliken
Color Range:	-0.457 to 0.457
<input type="checkbox"/> Show Numbers <input type="checkbox"/> Color Atoms by Charge <input checked="" type="checkbox"/> Symmetric Color Range <input type="checkbox"/> Fixed Color Range (from Preferences)	
Dipole Moment (Debye)	
Magnitude:	2.1187
Vector:	0.0000 0.0000 -2.1187
<input type="checkbox"/> Show Vector Scale: x 1	
Origin:	Default

Таким образом, программы «GAUSSIAN» и «GaussView» нашли широкое применение в научно-исследовательской деятельности из-за простоты использования и доступности.