

СРЕДСТВА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СОБЫТИЙ В БОЛЬШИХ, ВПЛОТЬ ДО НАНО-РАЗМЕРНЫХ, МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ

В.А. Дементьев

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН

Резко возросший интерес техники, физики и химии к нано-объектам ставит задачу, как анализа свойств этих объектов, так и прогнозирования их свойств не основе структурных моделей. В докладе предлагается обзор, как имеющихся средств для решения этой задачи, так и необходимых методов моделирования, которых пока нам недостает.

В результате разработки последовательной квантовой теории химических процессов на молекулярном уровне (Л.А. Грибов и В.И. Баранов) стало ясно, что определяющую роль в акте химического превращения, а также создания, передачи и запоминания информации в молекулярной среде, играет колебательная форма внутримолекулярного движения. Поэтому основное внимание в докладе уделено рассмотрению средств анализа колебательных состояний крупных молекулярных систем.

Отмечено, что в данный момент молекулярное моделирование уже готово к формированию моделей молекулярных сред без ограничений на их размеры и структурные особенности. Накопленный опыт работы с такими моделями на рабочих станциях и на суперкомпьютерах показал, что вычислительные алгоритмы теории колебаний молекул очень устойчивы и не страдают от накопления ошибок в процессе обработки больших массивов информации, если модели адекватны реальной действительности. А техника решения обратных задач и накопления информации в форме банков стандартных моделей позволяет сказать – чем крупнее модель, тем проще ее получать и анализировать.

Отмечено, что теория колебаний молекул вышла на новый уровень анализа событий в молекулярных средах. Так, решена задача о распространении механического возмущения в среде под воздействием теплового движения в окружающей среде. Тем самым закладывается физическая основа механохимии. Решается задача о безэталонном спектральном анализе смесей органических соединений. Ранее такие задачи даже не ставились. Теперь они успешно решаются.