

СИСТЕМА ВИЗУАЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ MATLAB

В.А. Дементьев

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

Давно сложившийся комплекс программ Lev для расчета колебательных спектров сложных молекул воспроизведен с использованием средства GUIDE MatLab. Инструмент программирования GUIDE (Graphical User Interface Development Environment) позволяет создавать программы с привычным интерфейсом Windows. В то же время получаемые программы могут включать в себя всю вычислительную мощь MatLab.

Выбор языка MatLab обусловлен хорошей переносимостью программ в форме открытого кода между различными вычислительными платформами. Открытый код позволит пользователю свободно добавлять к новому комплексу свои утилиты для вычисления специфических функций от рассчитанных частот и форм колебаний молекулярной модели. В то же время, этот код детально иллюстрирует процесс построения алгоритмов на основе теории, изложенной в книге Л.А. Грибова *Колебания молекул*, М., 2008.

Программы помогают формировать модель молекулы в визуальном режиме, задавая различными способами декартовы координаты атомов, в том числе, учитывая общую и локальную симметрию модели. Назначаются естественные колебательные координаты всех типов, причем многие координаты вводятся автоматически. Программы самостоятельно распознают все характерные ближние взаимодействия колебательных координат в матрицах силовых и электрооптических параметров модели. Возможно выделение фрагментов моделей и формирование более сложных моделей из таких фрагментов с автоматическим заполнением матриц эмпирических параметров.

Комплекс дополнен утилитами, выполняющими анализ получаемых в расчете колебательных спектров с визуализацией результатов анализа. В частности, имеется утилита, дающая качественную оценку вероятности химического превращения. Описание комплекса размещено в <http://intranet.geokhi.ru/LevML>.