

ПОДСИСТЕМА ВИЗУАЛИЗАЦИИ ИЗМЕНЕНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ

Смирнов А.В., Зеленко Л.С.

Самарский государственный аэрокосмический университет имени акад. С.П. Королева,
факультет информатики, кафедра программных систем
Россия, г. Самара, ул. Московское шоссе 34а
тел. (846) 267-46-73
E-mail: smirnov@i.am, LZelenko@rambler.ru

Исследование поверхностных слоев современными экспериментальными методами позволяет решить ряд фундаментальных задач физической химии. Расчет термодинамических характеристик адсорбции (ТХА) соединений разных классов на поверхностях разного типа необходим для предсказания процессов перехода адсорбции в хемосорбцию на «инертных» и химически активных поверхностях.

Разрабатываемая подсистема визуализации является расширением существующей автоматизированной системы расчёта ТХА [1], позволяющей моделировать процесс физической адсорбции для молекул разных классов органических соединений. В ходе моделирования поведения молекулы необходимо задавать и варьировать различные геометрические параметры: длины связей, валентные и торсионные углы. Графическая визуализация процесса адсорбции позволяет получить представление обо всех промежуточных конформациях и пространственных положениях молекулы, образованиях или разрывах связей между атомами.

Интеграция подсистемы визуализации с существующей системой происходит за счет использования общей базы данных параметров моделирования, поддерживающей многопользовательскую работу и возможность создания персональных экспериментальных расчетов. База данных предоставляет информацию о структуре молекулы и о шаге варьирования ее геометрических параметров, при этом пользователь имеет возможность настроить параметры самой визуализации, непосредственно наблюдая поведение 3D-модели молекулы на экране. Добиться акцентирования внимания на различных деталях процесса адсорбции можно, конфигурируя этапы анимации индивидуально, например, настраивая положение камеры в сцене, замедляя или ускоряя отдельные фрагменты анимации.

Ввод данных в систему также возможен с помощью самостоятельного задания промежуточных Z-матриц молекулы, ее смещения и связей между атомами, за счет этого могут быть использованы результаты расчетов из специализированного химического программного обеспечения (Gaussian, GAMESS, MOPAC и др.). В результате работы приложения пользователь получает видеофайл для презентации.

Литература.

1. Зеленко Л. С., Варфоломеева В. В. и др. Автоматизированная система расчёта термодинамических характеристик адсорбции. Самара: Вестник СГАУ, вып. №1, 2008. – с. 199-208.