

2. Batovrin V. K., Bessonov A. S., Moshkin V. V. *LabVIEW: praktikum po elektronike i mikroprotsessornoy tekhnike* [LabVIEW: workshop on electronics and microprocessor equipment]. Moscow, 2005. 182 p.
3. Voronkov E. N., Savinov I. S., Fayrushin A. V. *Avtomatizirovannyi laboratornyy praktikum s udalennym dostupom «Diody i tranzistory»* [The automated laboratory practical work with remote access "Diodes and transistors"]. Moscow, 2011.
4. Zaynutdinova L. Kh. *Sozdanie i primeneniye elektronnykh uchebnikov. Na primere obshchetekhnicheskikh distsiplin* [Creation and application of electronic textbooks. By the example of all-technical disciplines]. Astrakhan, 1999.
5. Sarafanov A. V., Sukovatyy A. G., Sukovataya I. Ye. et al. *Interaktivnye tekhnologii v distantsionnom obuchenii* [Interactive technologies in distance learning]. Krasnoyarsk, 2006. 132 p.
6. Karlashchuk V. I. *Elektronnaya laboratoriya na IBM PC. Laboratornyy praktikum na baze Electronics Workbench i MATLAB* [Electronic laboratory on IBM PC. A laboratory practical work on the basis of Electronics Workbench and MATLAB], 5th ed. Moscow, SOLON-Press, 2004. 800 p.
7. Nekrasova N. R., Kovalenko O. Yu. *Obshchaya elektrotekhnika i elektronika* [General electrical equipment and electronics]. Saransk, 2003. URL: http://toe.stf.mrsu.ru/demo_versia/, accessed 18 May 2011.
8. Stupina C. B. *Tekhnologii interaktivnogo obucheniya v vysshey shkole* [Technologies of interactive training at higher school]. Saratov, Publishing Center "Science", 2009. 56 p.
9. Sarafanov A. V., Toropov M. M. *Katalog litsenzyonnykh programnykh produktov, ispolzuemykh v SFU* [Catalog of license software products used at the Siberian Federal University]. Krasnoyarsk, Siberian Federal University, 2009, issue 4. 209 p.

УДК 539.193/.194;535/33.34

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ: МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ

*Элькин Михаил Давидович*¹, доктор физико-математических наук, Саратовский государственный технический университет, 410054, Российская Федерация, г. Саратов, ул. Политехническая, 77, e-mail: elkinmd@mail.ru

*Стефанова Галина Павловна*², доктор педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: fistpro@aspu.ru

*Крутова Ирина Александровна*², доктор педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: irinkrutova@yandex.ru

*Коломин Валентин Ильич*², доктор педагогических наук, Астраханский государственный университет, 414056, Российская Федерация, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а, e-mail: kolominagu@yandex.ru

Современные методы изучения молекулярных объектов позволяют получить достаточно четкие представления о структуре и физических свойствах молекул, особенности которых, однако, невозможно детализировать на основании результатов только экспериментального исследования. Особенно это касается оптических свойств молекулярных систем в различных фазовых состояниях. Методы молекулярного моделирования уже на протяжении последних двух десятилетий входят в арсенал современных теоретических методов исследования строения вещества. Однако преподавание основ указанного перспективного научного направления недостаточно внедряется в образовательный процесс подготовки студентов даже в ведущих университетах.

В данной статье предлагается возможный подход к обучению студентов молекулярному моделированию. Описаны возможности предлагаемой методики применительно к одной из основных задач молекулярного моделирования – интерпретация колебательных спектров сложных молекуляр-

ных соединений на основании неэмпирических квантовых расчетов их геометрии и параметров адиабатического потенциала, выявление полос для спектральной идентификации базовых молекулярных фрагментов.

Ключевые слова: молекулярная модель, методика молекулярного моделирования, адиабатический потенциал, ангармонизм молекулярных колебаний, ангармонический резонатор, интерпретация колебательных спектров, квантовые расчеты структуры и спектра молекул, итерация

MOLECULAR MODELING: METHODOLOGICAL ASPECTS

*Elkin Mikhail D.*¹, D.Sc. (Physics and Mathematics), Saratov State Technical University, 77 Polytechnicheskaya St., Saratov, 410054, Russian Federation, e-mail: elkinmd@mail.ru

*Stefanova Galina P.*², D.Sc. (Pedagogics), Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: fistpro@aspu.ru

*Krutova Irina A.*², D.Sc. (Pedagogics), Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: irinkrutova@yandex.ru

*Kolomin Valentin I.*², D.Sc. (Pedagogics), Astrakhan State University, 20a Tatishchev St., Astrakhan, 414056, Russian Federation, e-mail: kolominagu@yandex.ru

The article presents several modern methods of modeling molecular-sized objects, saying they make it possible to obtain a clearer view of the structure and physical properties of molecules. However, the peculiarities of these techniques should not be specified in terms of research trials alone. They apply equally as well, in the critique's view, to the optical properties of molecular systems in different physical states. Methods of molecular modeling have already been included over the past two decades in the arsenal of modern theoretical methods of investigating the structure of matter. Clearly, secondary school teaching of the foundations of perspective scientific direction is only a first step and should be followed by implementing a similar educational process for instructing students at leading universities.

In the course of the discussion, the paper suggests a possible approach for teaching molecular modeling. It dwells in depth on this approach when applied to one of the main objectives of molecular modeling – the vibration spectrum analysis of complex molecular compounds based upon non-observational quantum calculations of their geometry and adiabatic potential parameters – and also for revealing the spectral identification of minute molecular fragments.

Key words: molecular model, methods of molecular modeling, adiabatic potential, anharmonicity of molecular vibrations, anharmonic resonator, interpretation of vibrational spectra, quantum calculations of molecule structure and spectrum, iteration

Введение. Молекулярное моделирование – новое, динамично развивающееся научное направление в физике молекул. Современные методы изучения молекулярных объектов позволяют получить достаточно четкие представления об их структуре и физических свойствах, особенности которых, однако, невозможно детализировать на основании результатов только экспериментального исследования. Здесь и появляется необходимость дополнительного привлечения модельных представлений и вычислительных схем для интерпретации экспериментальных данных. Особенно это касается оптических свойств молекулярных систем в различных фазовых состояниях.

Однако приходится констатировать, что преподавание основ указанного перспективного научного направления слишком робко внедряется в учебный процесс даже ведущих университетов страны, хотя методы молекулярного моделирования уже на протяжении последних двадцати лет входят в арсенал современных теоретических методов исследования строения вещества.

Одной из причин сложившейся ситуации, на наш взгляд, является отсутствие доступной, с точки зрения педагогики, методики молекулярного моделирования. Далее предлагается возможный подход к ее описанию применительно к колебательной спектроскопии.

Принято считать, что физико-химические свойства молекулярной системы как квантового объекта определяют адиабатический потенциал, отражающий строение электронной оболочки (электронной подсистемы) молекулы в рассматриваемом электронном состоянии и проявляющийся в ее оптических спектрах.

При анализе формы адиабатического потенциала исходят из модельного уравнения Шредингера для ансамбля электронов при выбранной конфигурации ядер (геометрии ядерной подсистемы молекулы). Координаты ядер в такой модели рассматриваются в качестве параметров [2]:

$$\left(\hat{H}_e - \varepsilon \right) \Psi (x, q) = 0, \quad (1)$$

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + U(x, q);$$

$\hat{T}_e = -\hbar^2/2m_e \Delta_i$ – оператор кинетической энергии электронов;
 $U(x, q) = -e^2(Z_r/R_{ri} + 1/R_{ij} + Z_r Z_i/R_{ri})$ – потенциальная часть уравнения (кулоновское взаимодействие всех ядер и электронов в молекулярной системе).

Аналитическое решение для адиабатического потенциала как скалярной функции ядерных координат не представляется возможным, поэтому применяемые численные методы связаны с оценкой коэффициентов разложения адиабатического потенциала в ряд по криволинейным ядерным координатам q_a относительно равновесной ядерной конфигурации, соответствующей минимуму адиабатического потенциала. Такие коэффициенты принято называть квадратичными, кубическими и квартичными силовыми постоянными

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n0} + K_{ab} q^a q^b + K_{abc} q^a q^b q^c + K_{abcd} q^a q^b q^c q^d + \dots \quad (2)$$

Современные информационные технологии, используемые в молекулярной динамике, позволяют оценить коэффициенты ряда (2) и перейти к решению модельного квантового уравнения для ядерной подсистемы [3]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial q^a} T^{ab} \frac{\partial}{\partial q^b} + K_{ab} q^a q^b + K_{abc} q^a q^b q^c + K_{abcd} q^a q^b q^c q^d + \dots - E \right) X_n(q) = 0, \quad (3)$$

где $T^{ab} = \sum m_N^{-1} B_{N\alpha}^a B_{N\alpha}^b$ – матрица кинематических коэффициентов;

$B_{N\alpha}^a = \partial q^a / \partial x^{N\alpha}$ – метрика ядерных координат; $X_{N\alpha}$ – декартовы координаты ($\alpha = x, y, z$) атома N.

К числу таких технологий относится известный программный комплекс “Gaussian” [12], где решение задачи осуществляется в системе нормальных координат, линейно связанных с декартовыми координатами ядер. Такие координаты лишены физического смысла, поэтому для интерпретации колебательного спектра исследуемого соединения и последующего решения фундаментальной задачи «свойства – структура – спектр» необходимо перейти к описанию молекулярной динамики в системе естественных колебательных координат. Таковыми являются изменения длин валентных связей и валентных углов в молекуле, двугранные углы между плоскостями молекулярных фрагментов [5].

Решение уравнения (3) методами теории возмущения приводит к известному выражению для энергий ангармонических колебательных состояний:

$$E_{\vartheta_1, \vartheta_2 \dots \vartheta_{3N-6}} = \sum_{s=1}^{3N-6} \omega_s (\vartheta_s + 1/2) + \sum_{i,j=1}^{3N-6} X_{ij} (\vartheta_i + 1/2)(\vartheta_j + 1/2), \quad (4)$$

где ν_i – колебательные квантовые числа; X_{ij} – ангармонические постоянные, являющиеся функциями кубических и квартичных силовых постоянных, постоянных кинематической ангармоничности резонансных функций [3].

Первое слагаемое в выражении (4) описывает гармонические колебания ядерной подсистемы молекулярного объекта, второе – учитывает ангармонизм.

Изложенную схему к решению квантового уравнения Шредингера для молекулярной системы принято называть адиабатическим приближением в молекулярной динамике. На этом пути появляется реальная возможность оценить равновесную конфигурацию молекулярного соединения, коэффициенты разложения адиабатического потенциала, колебательные состояния ядерной подсистемы, интенсивности квантовых переходов, выяснить механизм межмолекулярного взаимодействия, другими словами, построить структурно-динамическую модель молекулярного соединения.

Вместе с тем колебательное движение ядерной подсистемы молекулы допускает классическую интерпретацию: ядра, связанные упругими силами, совершают малые колебания относительно положения их равновесия и одновременно участвуют во вращательном и поступательном движении как система материальных точек [5].

Перейдем к задаче программно-алгоритмической поддержки одной из основных задач молекулярного моделирования – теоретической интерпретации эксперимента по колебательным спектрам молекулярных систем и выявления признаков их спектральной идентификации.

Алгоритмы технологии интерпретации колебательных спектров. Весь набор предлагаемых алгоритмов условно можно разделить на три части. Первая часть связана с созданием интерфейса программного приложения и включает обработку выходных данных программного комплекса “Gaussian-03” под формат входных данных технологии “Vibration-2010” для табличного редактора “Excel”. Создание интерфейса осуществляется в диалоговом режиме.

Вторая основная часть набора содержит алгоритмы решения прямой и обратной механической задачи теории молекулярных колебаний, оценки ангармонического сдвига полос. В качестве исходных данных используются геометрические параметры молекулы, полученные из рентгенографического, микроволнового электронографического эксперимента или из результатов оптимизации исходной геометрии с помощью пакета “Gaussian”; декартовы смещения атомов при нормальных колебаниях как результат моделирования гармонического силового поля исследуемого соединения; топологический массив (Z -матрица), определяющий систему естественных колебательных координат; массив коэффициентов симметрии [5]; массив масштабирующих коэффициентов для гармонического силового поля; массив весовых коэффициентов для отражения надежности предложенного экспериментального отнесения спектра; экспериментальный набор фундаментальных колебаний базового соединения и его изотопозамещенных аналогов.

Отметим, что результаты моделирования геометрической структуры с помощью неэмпирических квантовых методов совпадают с экспериментальными данными с точностью, необходимой для решения задачи интерпретации колебательных спектров многоатомных молекул. Достаточно сослаться на работу [3], где такие исследования проведены для соединений различных классов. При этом выбор атомного базиса в численных методах оптимизации геометрии существенного значения не имеет. Однако при оценке гармонических силовых констант такая зависимость имеет место [3] и может достигать величины $\sim 100 \text{ см}^{-1}$.

Алгоритм получения системы гармонических ангармонических силовых постоянных в системе естественных колебательных координат основан на метрических соотношениях, связывающих естественные колебательные координаты с декартовыми смещениями атомов. В его основу положено основное операторное соотношение тензорного анализа, адаптированное к решению задач молекулярного моделирования [3]:

$$\hat{T}_{a'b'...c'} = B_{a'}^a B_{b'}^b \dots B_{c'}^c \hat{T}_{ab...c}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{T}_a &= \frac{\partial}{\partial q^a}, \quad \hat{T}_{ab} = \frac{\partial \hat{T}_a}{\partial q^b} - \Gamma_{ab}^f \hat{T}_f, \\ \hat{T}_{abc} &= \frac{\partial \hat{T}_{ab}}{\partial q^c} - \Gamma_{ac}^f \hat{T}_{bf} - \Gamma_{bc}^f \hat{T}_{af}. \end{aligned} \quad (7)$$

Данное соотношение позволяет связать операторы дифференцирования в произвольных системах криволинейных координат $\{q^a\}$ и $\{q^{a'}\}$ с основными понятиями тензорного анализа [4], каковыми являются дифференциальный закон преобразования координат $B_{a'}^a$ (метрика), ковариантные g_{ab} и контравариантные g^{ab} метрические тензоры, символы Кристоффеля Γ_{bc}^a [3].

Операторное соотношение (6) позволяет оценить так называемую кинематическую ангармоничность в теории молекулярных колебаний, учитывающую свойство криволинейности естественных колебательных координат как скалярных величин [3].

Алгоритм получения метрических соотношений, связывающих естественные колебательные координаты с декартовыми координатами атомов в молекуле, базируется на одном определяющем выражении, представляющем обычное скалярное произведение векторов. Его дифференцирование по декартовым координатам атомов позволяет получить выражения как для так называемых S-векторов Вильсона-Ельяшевича [5] (первые производные или метрику), так и параметры кинематической ангармоничности [3].

Для координаты типа q-изменение длины связи S_{ij} , образованной атомами с номерами i и j , определяющим является следующее выражение для длины рассматриваемой связи через декартовые координаты:

$$S_{ij} = \left(\sum_{\alpha} (R^{j\alpha} - R^{i\alpha})^2 \right)^{1/2}. \quad (8)$$

Для координаты типа β -изменение угла между двумя единичными векторами e_{ij} и e_{kl} определяющее соотношение имеет вид:

$$\cos \beta = \sum_{\delta} e_{ij}^{\delta} \cdot e_{kl}^{\delta}. \quad (9)$$

При рассмотрении типа координат ρ -изменение угла между связью e_{ij} и плоскостью, образованной векторами e_{kl} и e_{rt} , определяющим является выражение

$$\cos \rho = \vec{H} \cdot \vec{e}_{ij}, \quad (10)$$

где H – координаты нормального к плоскости вектора

$$H^{\delta} = \cos \beta \cdot \sum e_{\delta\alpha\beta} \cdot e_{kl}^{\alpha} \cdot e_{rt}^{\beta}, \quad (11)$$

где $e_{\delta\alpha\beta}$ – антисимметричный тензор третьего ранга.

Для координаты типа χ , определяемой как изменение угла между плоскостями, заданными двумя тройками атомов (ijk) и (lrt), определяющим является соотношение

$$\text{Cos}\chi = \vec{H}(i, j, k) \cdot \vec{H}(l, r, t). \quad (12)$$

Если нормальные векторы плоскостей коллинеарны ($\text{Sin}\chi = 0$), то вводится дополнительный вектор

$$\vec{f} = \vec{e}_{jk} \cdot \text{Co sec } \beta - \vec{e}_{jr} \cdot \text{Ctg} \beta. \quad (13)$$

Искомая естественная координата представляется суммой

$$\chi = \chi_1 + \chi_2, \quad (14)$$

для которой

$$\cos \chi_1 = \vec{H}_1 \cdot \vec{f}, \quad \cos \chi_2 = \vec{H}_2 \cdot \vec{f}.$$

Для вычисления параметров кинематической ангармоничности в молекулярной динамике как производных от элементов матрицы кинематических коэффициентов по естественным колебательным координатам $Q = q, \beta, R, \chi$

$$T^{vw} = \sum B_{N\alpha}^v \cdot B_{N\alpha}^w / m_N \quad (15)$$

$$\frac{\partial T^{vw}}{\partial Q} = \frac{\partial T^{vw}}{\partial R^{M\gamma}} \cdot \frac{\partial R^{M\gamma}}{\partial Q} \quad (16)$$

используется производная от элемента контравариантного тензора по декартовой координате

$$\frac{\partial T^{vw}}{\partial R^{M\gamma}} = \sum (B_{N\alpha M\gamma}^v \cdot B_{N\alpha}^w + B_{N\alpha}^v \cdot B_{N\alpha M\gamma}^w) / m_N. \quad (17)$$

Обратная метрика, связывающая декартовые координаты с естественными координатами, имеет вид

$$\frac{\partial R^{M\gamma}}{\partial Q^c} = (B_a^{N\alpha} \cdot B_c^{N\alpha}) \cdot B_{M\gamma}^a / m_M = (T^{ac})^{-1} \cdot B_{M\gamma}^a / m_M. \quad (18)$$

Операторное соотношение (6) позволяет связать силовые константы в декартовых и естественных координатах, что приводит к выражениям:

$$\frac{\partial U}{\partial x^{N\alpha}} = \frac{\partial q^a}{\partial x^{N\alpha}} \cdot \frac{\partial U}{\partial q^a} = B_{N\alpha}^a \frac{\partial U}{\partial q^a} \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^{N\alpha} \partial x^{K\beta}} = B_{N\alpha}^a B_{K\beta}^b \frac{\partial^2 U}{\partial q^a \partial q^b} + B_{N\alpha K\beta}^a \cdot \frac{\partial U}{\partial q^a} \quad (20)$$

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial q^a \partial q^b} \right)_0 = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^{N\alpha} \partial x^{K\beta}} \right)_0 \cdot B_a^{N\alpha} \cdot B_b^{K\beta} \quad (21)$$

$$\frac{\partial^3 U}{\partial x^{N\alpha} \partial x^{K\beta} \partial x^{M\gamma}} = B_{N\alpha}^a B_{K\beta}^b B_{M\gamma}^c * \quad (22)$$

$$\left\{ U_{abc} - \Gamma_{ac}^f U_{bf} - \Gamma_{bc}^f U_{af} - \Gamma_{ab}^f U_{cf} + B_{N\alpha K\beta M\gamma}^a U_a \right\} \\ \Gamma_{ab}^f = -B_{N\alpha K\beta}^f \cdot B_a^{N\alpha} \cdot B_b^{K\beta}. \quad (23)$$

Матрица S-векторов (метрика, связывающая введенные естественные колебательные координаты с декартовыми координатами атомов) является промежуточным этапом расчетной схемы и позволяет получить метрические соотношения, связывающие естественные колебательные координаты с нормальными координатами. Это шаг к идентификации колебаний, по-

скольку указанная метрика (матрицы форм нормальных колебаний [5]) определяет долю участия того или иного молекулярного фрагмента в рассматриваемом нормальном колебании.

Аналитическое выражение для элементов матрицы форм следует из ее определения

$$L_s^a = B_{N\alpha}^a B_s^{N\alpha}. \quad (24)$$

Суммирование, как это принято в векторной алгебре, осуществляется по повторяющимся индексам в правой части выражений. Первый множитель в выражении (24) есть элементы рассчитываемой матрицы S-векторов, второй – смещения атомов из положения равновесия при нормальных колебаниях, что, как указано выше, является выходными данными программного продукта “Gaussian” и входными данными приложения “Vibration-2011”.

Принято нормировать матрицу форм следующим образом:

$$T^{ab} = L_v^a L_v^b, \quad U_{ab} = L_s^a \lambda_s L_s^b. \quad (25)$$

Второе соотношение в выражении (25) используется в итерационном алгоритме получения эффективного силового поля для совокупности изотопозамещенных соединений, чаще всего дейторозамещенных [3]. Для этого на каждом шаге итерации для нахождения эффективного силового поля в выражении для элементов матрицы U_{ab} в качестве параметров λ_s используются экспериментальные значения частот колебаний.

Поскольку процесс итерации зависит от выбора исходного приближения в оценке гармонического силового поля, то в расчетной схеме предусмотрен алгоритм сглаживания процесса итерации за счет массива масштабирующих коэффициентов.

Автономными макросами, обеспечивающими сервисные возможности приложения “Vibration-2011”, являются макросы оценки ангармонического смещения полос при учете кубических и квартичных параметров адиабатического потенциала в выражении (2) в рамках адиабатической теории возмущения второго порядка, что позволяет выяснить провозможность используемой схемы теории возмущения и наличие ангармонических резонансов.

Предлагаемый алгоритм использует следующие выражения [8] для ангармонических констант в выражении (4):

$$\chi_{ss} = 1/16 F_{ssss} - 5/48 (F_{sss})^2 / v_s + 1/32 (F_{srr})^2 (\Omega(s; s; -r) - \Omega(s; s; r) - 12\Omega(r; r; r)) (1 - \delta_{sr})$$

$$\chi_{sr} = 1/16 F_{ssrr} - 1/8 (F_{ssr})^2 (\Omega(s; s; -r) + \Omega(s; s; r)(1 - \delta_{sr}) + 3/8 (F_{srr})^2 (\Omega(s; r; t) - \Omega(s; r; -t) + \Omega(s; -r; t) - \Omega(s; -r; -t))(1 - \delta_{sr})(1 - \delta_{st})(1 - \delta_{rt}) + L(a; sr)^2 / (\Omega(s; r; 0) + \Omega(s; -r; 0)) / 2. \quad (26)$$

Ангармоническое смещение фундаментальных полос колебаний определяется ангармоническими поправками $X_{ii} = 2 \chi_{ii}$ и $X_i = 1/2 \sum \chi_{ir}$. Резонансные знаменатели $\Omega(s; \pm r; \pm t) = (v_s \pm v_r \pm v_t)^{-1}$ для ангармонических постоянных в выражении (26) ограничивают область их применения [8].

Алгоритм анализа ангармонических резонансов Ферми между фундаментальными (v_i) и обертовыми ($v_j + v_k$) колебательными состояниями базируется на следующем соотношении [1]:

$$E = \{(v_i + v_j + v_k) \pm (F_{ijk}^2 (1 + \delta_{jk}) / 2 + ((v_i - v_j - v_k)^2)^{1/2})\} / 2. \quad (27)$$

Первоначально осуществляется поиск обертоновых состояний, близких к рассматриваемому фундаментальному состоянию в пределах выбранного значения энергетической щели, затем строится матрица энергетического взаимодействия для расчета для каждой пары резонирующих состояний по соотношению (27), затем решается задача на собственные числа сформированной матрицы, определяющие расхождение резонирующих состояний.

При создании программного приложения использован табличный редактор технологии Excel. Выбор продиктован высокими сервисными возможностями данного приложения MSO, простотой языка программирования VBA в создании пользовательских приложений для научных и учебных целей, доступностью самого редактора.

Заключение. Описаны возможности предлагаемой методики одной из основных задач молекулярного моделирования – интерпретация колебательных спектров сложных молекулярных соединений на основании неэмпирических квантовых расчетов их геометрии и параметров адиабатического потенциала, выявление полос для спектральной идентификации базовых молекулярных фрагментов. Работоспособность предлагаемых в методике алгоритмов и достоверность предсказательных расчетов молекулярных параметров продемонстрирована в ряде работ авторов [6, 7, 9–11]. Предлагаемая методика внедрена в образовательный процесс подготовки бакалавров и магистров по направлению «Физика».

Список литературы

1. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг. – Москва : ИЛ, 1949. – 647 с.
2. Минкин В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – Ростов-на-Дону : Феникс, 1997. – 560 с.
3. Пулин В. Ф. Исследование динамики молекулярных соединений различных классов / В. Ф. Пулин, М. Д. Элькин, В. И. Березин. – Саратов : Изд-во Саратов. гос. техн. ун-та, 2002. – 548 с.
4. Рашевский П. К. Риманова геометрия и тензорный анализ / П. К. Рашевский. – Москва : Наука, 1967. – 664 с.
5. Свердлов Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – Москва : Наука, 1970. – 560 с.
6. Элькин П. М. Моделирование структуры и колебательных спектров кислородосодержащих соединений / П. М. Элькин, Т. А. Шальнова, О. Н. Гречухина // Известия Саратовского гос. ун-та. Сер. Физика. – 2009. – Т. 9, № 1. – С. 27–33.
7. Элькин П. М. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний полихлорзамещенных дибензо-п-диоксинов / П. М. Элькин, М. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 1. – С. 21–24.
8. Элькин М. Д. Учет ангармонического смещения полос в модельных расчетах колебательных спектров димеров с водородной связью / М. Д. Элькин, Л. М. Бабков // Известия Саратовского гос. ун-та. Сер. Физика. – 2011. – Т. 11, вып. 1. – С. 20–25.
9. Эрман Е. А. Информационная технология “Gaussian” и структурно-динамические модели кислородосодержащих соединений / Е. А. Эрман, П. М. Элькин, О. Н. Гречухина // Вестник Саратовского гос. техн. ун-та. – 2009. – № 2 (39), вып. 2. – С. 108–114.
10. Эрман Е. А. Моделирование структуры и спектров замещенных бензойной кислоты / Е. А. Эрман, М. Д. Элькин, О. Н. Гречухина, А. М. Лихтер // Естественные науки. – 2011. – № 1 (34). – С. 206–212.
11. Эрман Е. А. Модельные оценки ангармонического смещения полос в колебательных спектрах димеров карбоновых кислот / Е. А. Эрман, М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова // Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии. – 2010. – № 4 (12). – С. 53–58.
12. Frisch M. J. Gaussian 03, Revision A.7. / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh (PA) : Gaussian Inc., 2003.

References

1. Gertsberg G. *Kolebatelnye i vrashchatelnye spektry mnogoatomnykh molekul* [Vibrational and rotational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, IL, 1949. 647 p.
2. Minkin V. I., Simkin B. Ya., Minyaev R. M. *Teoriya stroeniya molekul* [Theory of molecule structure]. Rostov-on-Don, Phoenix, 1997. 560 p.
3. Pulin V. F., Elkin M. D., Berezin V. I. *Issledovanie dinamiki molekulyarnykh soedineniy razlichnykh klassov* [Research of dynamics of molecular compounds of various classes]. Saratov, Saratov State Technical Univ. Publ. House, 2002. 548 p.
4. Rashevskiy P. K. *Rimanova geometriya i tenzornyy analiz* [Riemannian geometry and tensor analysis]. Moscow, Nauka, 1967. 664 p.
5. Sverdlov L. M., Kovner M. A., Krainov Ye. P. *Kolebatelnye spektry mnogoatomnykh molekul* [Vibrational spectra of polyatomic molecules]. Moscow, Nauka, 1970. 560 p.

6. Elkin P. M., Shalnova T. A., Grechukhina O. N. Modelirovanie struktury i kolebatelnykh spektrov kislorodosoderzhashchikh soedineniy [Modeling of structure and vibrational spectra of oxygen-containing compounds]. *Izvestiya Saratovskogo gos. un-ta. Ser. Fizika* [News of Saratov State University. Series Physics], 2009, vol. 9, no. 1, pp. 27–33.
7. Elkin P. M., Erman M. A., Pulin O. V. Strukturno-dinamicheskie modeli i angarmonicheskiy analiz kolebatelnykh sostoyaniy polikhlorzameshchennykh dibenzo-n-dioksinov [Structural and dynamic models and anharmonic analysis of vibrational states of polychlorine-substituted dibenzo-n-dioxines]. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2007, vol. 74, no. 1, pp. 21–24.
8. Elkin M. D., Babkov L. M. Uchet angarmonicheskogo smeshcheniya polos v modelnykh raschetakh kolebatelnykh spektrov dimerov s vodorodnoy svyazyu [The accounting of anharmonic shift of bands in model calculations of vibrational spectra of dimers with hydrogen bond]. *Izvestiya Saratovskogo gos. un-ta. Ser. Fizika* [News of Saratov State University. Series Physics], 2011, vol. 11, issue 1, pp. 20–25.
9. Erman Ye. A., Elkin P. M., Grechukhina O. N. Informatsionnaya tekhnologiya “Gaussian” i strukturno-dinamicheskie modeli kislorodosoderzhashchikh soedineniy [Information technology “Gaussian” and structural and dynamic models of oxygen-containing compounds]. *Vestnik Saratovskogo gos. tekhn. un-ta* [Bulletin of Saratov State Technical University], 2009, no. 2 (39), issue 2, pp. 108–114.
10. Erman Ye. A., Elkin M. D., Grechukhina O. N., Likhter A. M. Modelirovanie struktury i spektrov zameshchennykh benzoynoy kisloty [Modeling of structure and spectra of benzoic acid substituted]. *Yestestvennye nauki* [Natural Sciences], 2011, no. 1 (34), pp. 206–212.
11. Erman Ye. A., Elkin M. D., Dzhalnukhambetova Ye. A. Modelnye otsenki angarmonicheskogo smeshcheniya polos v kolebatelnykh spektrakh dimerov karbonovykh kislot [Model estimates of anharmonic shift of bands in vibrational spectra of carbonic acid dimers]. *Prikaspiyskiy zhurnal: upravlenie i vysokie tekhnologii* [Caspian magazine: management and high technologies], 2010, no. 4 (12), pp. 53–58.
12. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. *Gaussian 03, Revision A.7*. Pittsburgh (PA), Gaussian Inc., 2003.