

Обработка результатов квантово-химических расчетов с помощью программы P-Analysis

© Егоров¹⁺ Даниил Леонидович, Шамов^{2*} Александр Георгиевич
и Храпковский³ Григорий Михайлович

¹ Научно-исследовательский отдел компьютерной химии; ² Отделение информатизации;

³ Кафедра катализа. Казанский национальный исследовательский технологический университет.

Ул. К. Маркса, 68. г. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.

Тел.: (843) 231-42-53. E-mail: egorovdl2015@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: квантово-химический расчет, обработка результатов, исследование механизмов реакций, программное обеспечение.

Аннотация

В работе описывается новая компьютерная программа P-Analysis, предназначенная для обработки результатов квантово-химических расчетов, проведенных с помощью программы Prigoda. Программа анализирует выходные файлы расчетов и в зависимости от выбранного пользователем режима формирует таблицы, содержащие информацию о самих расчетах и соответствующие им термодинамические параметры. Имеется два режима работы: отдельное соединение и элементарный акт. В первом случае на выходе будут представлены основные термодинамические параметры рассматриваемых соединений. Основная ценность данного режима состоит в возможности получить информацию сразу для большого количества выходных файлов расчетов. Второй режим упрощает исследование химических реакций. В качестве исходной информации для программы пользователь указывает расположение выходных файлов переходного состояния, продуктов и реагентов. Программа проанализирует их и представит для каждой из этих трех структур информацию о термодинамических параметрах, а также произведет вычисление активационных параметров исследуемой реакции, в частности, энергии активации, энтальпии активации, энергии Гиббса активации (указанные характеристики будут вычислены как для прямой, так и для обратной реакции). Результаты обработки в зависимости от выбора пользователя могут быть автоматически сведены в таблицу в формате CSV, либо MS Word. Приложение является оконным, но имеется возможность работы через командную строку, что позволяет производить пакетную обработку выходных файлов для большого количества исследованных реакций. Для этих целей необходимо сформировать текстовый файл, содержащий информацию, необходимую для проведения обработки. Этап обработки результатов может быть встроен в итерационный процесс автоматического исследования ППЭ с применением программы Prigoda и оболочки P-AutoExtremum. Когда завершится расчет переходного состояния, будут проведены спуски по координате реакции к продуктам и реагентам, а также осуществлен поиск точных минимумов, которые им соответствуют, P-AutoExtremum автоматически сформирует текстовый файл с параметрами обработки и инициирует запуск P-Analysis.