

ОСОБЕННОСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

ФРАГМЕНТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ДЕЙСТВИТЕЛЬНОСТИ

Каримов М. Ф., канд. физ.- мат. наук, доцент

Никонова Н. А., студент

г. Бирск, ФГБОУ ВПО Бирский филиал БашГУ

Во второй половине двадцатого века в связи с появлением в Северной Америке и Западной Европе электронно – вычислительных машин открылась возможность компьютерного моделирования объектов, процессов и явлений природной и технической действительности [1].

С того времени в химической науке развивается направление компьютерного моделирования объектов, процессов и явлений химической природы.

В связи с тем, что ежегодно число исследователей химической действительности с помощью компьютеров увеличивается, рассмотрим особенности информационного моделирования химических объектов, процессов и явлений.

К числу объектов химической действительности, подлежащих компьютерному моделированию, относятся атомы, молекулы, кристаллические и аморфные вещества.

Одним из основных объектов химической науки является молекула водорода H_2 .

Первыми при компьютерном расчете волновых функций молекулы водорода были американские ученые В.Колос и К.Рутаан [2]. Они в 1960 году использовали волновую функцию молекулярной системы, содержащую 50 членов в сумме. Такие громоздкие вычисления стали осуществимы только благодаря появлению быстродействующих электронных вычислительных машин в начале пятидесятых годов двадцатого века.

В настоящее время большинство химических процессов моделируется с помощью компьютеров. Тому примером является компьютерное моделирование горения природного газа в цементной вращающейся печи [3].

При расчетах параметров сложных химических явлений в двадцать первом веке используются мощные суперкомпьютеры. Например, в российской федерации было смоделировано явление изомеризации сложных молекул [4].

Междисциплинарные процессы и явления тоже успешно моделируются с помощью электронно – вычислительных машин или компьютеров.

Нами были произведены компьютерные расчеты параметров доменной структуры аморфных пленок гадолиний-кобальт, обладающих перпендикулярной магнитной анизотропией [5].

Основной особенностью компьютерного моделирования фрагментов химической действительности является последовательное построение исследователем химической, физической и математической модели объекта, процесса или явления.

В этой связи химику – исследователю, осуществляющему компьютерное моделирование объектов, необходимо одновременное хорошее знание химии, физики, математики и информатики.

Анализ и обобщение приведенного выше краткого материала позволяют сформулировать вывод о том, что компьютерное моделирование фрагментов химической действительности позволяет повысить качество научного познания и преобразования материального мира.

Литература

1. Каримов М.Ф. Компьютерное предоставление научной информации исследователям химической действительности // Башкирский химический журнал, 2005. Т.12. № 4. С. 30–35.
2. Kolos W., Roothaan C.C.J. Accurate electronic wave functions for the H₂ molecule // Review Modern Physics, 1960.Vol.32. P. 219-232.
3. Кузнецов В.А., Трулев А.В. Компьютерное моделирование горения природного газа в цементной вращающейся печи // Современная наука, 2012. №2(10). С. 108-112.
4. Грибов Л.А., Дементьев В.А., Завалий М.В., Баранов В.И. Компьютерное моделирование изомеризации сложных молекул с использованием суперкомпьютера типа МВС 1000 // Журнал структурной химии, 2005. Т.6. № 2. С. 303–310.

5. Кандаурова Г.С., Каримов М.Ф., Васьковский В.О. Параметры доменной структуры аморфных пленок Gd-Co разного состава // Физика твердого тела, 1981. Т.23. Вып.3. С. 720–723.