



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА  
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ  
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):  
2023617012

Дата регистрации: 04.04.2023

Номер и дата поступления заявки:  
2023616021 31.03.2023

Дата публикации и номер бюллетеня:  
04.04.2023 Бюл. № 4

Автор(ы):

Ильяшенко Иван Николаевич (RU),  
Мартемьянов Николай Анатольевич (RU),  
Ищенко Алексей Владимирович (RU),  
Вайнштейн Илья Александрович (RU)

Правообладатель(и):

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего  
образования «Уральский федеральный  
университет имени первого Президента России  
Б.Н.Ельцина» (RU)

Название программы для ЭВМ:

Программа визуализации результатов квантово-химического моделирования ИК- и КР-спектров твердых тел «SpIR QE»

Реферат:

Программа предназначена для обработки результатов квантово-химических расчетов фоновых состояний, полученных с помощью кодов ph.x и dynmat.x пакета Quantum ESPRESSO. Программа анализирует файл с выходными данными, определяет число нормальных мод, считывает полученные положения максимумов и интенсивностей пиков в спектрах пропускания излучения инфракрасного (ИК) диапазона и комбинационного рассеяния света (КР). На основе считанных данных и заданной пользователем ширины пика на полувысоте рассчитываются соответствующие ИК- и КР-спектры в виде суперпозиции полос лоренцевой формы. Данные для построения графиков сохраняются в текстовый файл. Разработанная программа может быть использована для проведения научных исследований и при выполнении студентами лабораторных работ по соответствующим учебным дисциплинам. Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК на базе процессора Intel Pentium и выше. ОС: Microsoft Windows 7 и выше, Linux Ubuntu 14.04 LTS и выше.

Язык программирования: C++

Объем программы для ЭВМ: 4 КБ