



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):
2022664375

Дата регистрации: 28.07.2022

Номер и дата поступления заявки:
2022663441 19.07.2022

Дата публикации и номер бюллетеня:
28.07.2022 Бюл. № 8

Автор(ы):

Матищев Александр Игоревич (RU),
Бунтов Евгений 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:

Программный модуль для расчета плазменного синтеза углеродных покрытий методом гибридной EIQMM-динамики с использованием электростатического связывания QMPlasm

Реферат:

Программа позволяет производить расчеты сил и энергии атомной системы гибридным квантово-классическим методом и используется в рамках среды The Atomic Simulation Environment (ASE), написанном на языке Python. Программа используется для реализации молекулярной динамики. Имеющийся в среде ASE модуль EQMMM был разработан для проведения моделирования жидкофазных и газофазных систем, из-за чего имеются проблемы с реализацией моделирования плазменного синтеза, где имеются одновременно газовая и твердые фазы. Поэтому был разработан собственный модуль для QM/MM вычислений, в котором реализованы преимущества как EQMMM (включение электростатического взаимодействия в расчеты QM и наличие явного взаимодействия между QM и MM областями), так и FQMMM (наличие буферной зоны). На основе разработанного модуля реализована программа для моделирования плазменного синтеза углеродных покрытий. Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК; ОС: Windows, Mac OS, Linux.

Язык программирования: Python

Объем программы для ЭВМ: 18 КБ