



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):
2018666706

Дата регистрации: 19.12.2018

Номер и дата поступления заявки:
2018619704 11.09.2018

Дата публикации и номер бюллетеня:
19.12.2018 Бюл. № 12

Контактные реквизиты:
9022604519@mail.ru

Автор(ы):

Бунтов Евгений Александрович (RU),
Зацепин Анатолий Федорович (RU),
Касьянова Анна Владимировна (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:

Комплекс подпрограмм для подготовки данных и постобработки результатов моделирования углеродных цепей «DFT Carbypoid».

Реферат:

Программа предназначена для автоматизированной подготовки входных данных (файлов) и обработки результатов квантово-химического моделирования атомной, электронной структуры и свойств линейно-цепочечного углерода в пакете ABINIT. Первая группа подпрограмм реализует генерацию исходных данных и автоматический подбор параметров для расчетов структуры и нелинейных оптических свойств (комбинационного рассеяния света - КРС). Координаты атомов в углеродных цепях с переменной длиной линейного фрагмента и углом изгиба рассчитываются в рамках модели Хейнмана. Вторая группа подпрограмм обеспечивает обработку результатов первичного расчета и формирование списка частот и интенсивностей линий КРС. Третья часть подпрограмм конвертирует выходные файлы пакета ABINIT в формат XYZ с поддержкой анимации, пригодный для визуализации атомной структуры.

Язык программирования: Bash script

Объем программы для ЭВМ: 22 Кб