Параллельная реализация алгоритма нахождения объёма полиэдрических молекул

Хузин А.Ф.[2], Губайдуллин И.М.[1], Сабиров Д.Ш.[1], Закирова А.Д.[1]
1- Институт нефтехимии и катализа РАН,
2-Башкирский государственный университет

Молекулы фуллерена имеют большую внутреннюю полость, куда можно инкапсулировать другие атомы и ионы. Для C_{60} и C_{70} стали рассматриваться разные варианты образования их эндоэдральных комплексов[1].

Эндофуллерены – соединения, в которых внутри молекулы фуллерена размещен один или несколько неуглеродных атомов. Интерес к таким инкапсулированным фуллеренам обусловлен многими причинами. В частности, такие молекулы предполагается использовать в качестве блоков наноустройств и нанокапсул для хранения газов, также изменяются свойства – магнитный момент, электрический заряд, молекулярная масса. Ключевым параметром, характеризующим возможность инкапсулирования, является внутренний объем фуллерена, который может изменяться при переходе от одного фуллерена к другому, а также при функционализации их молекул. [1]

Для нахождения объёма фуллерена была разработана программа «Volume» являющаяся составной частью информационно-аналитического подхода для изучения реакционных способностей сложных молекул, комплексов и многостадийных механизмов. [2] Программа рассчитывает только объём фуллеренов, содержащих 5-6 членные циклы.

Возникает новая задача: построение универсального алгоритма и разработка соответствующей программы по расчёту объёма полиэдрических молекул.

Параллельный алгоритм включает использование триангуляции. Будет использоваться триангуляция Делоне. Исходя из сложности реализации и трудоемкости был выбран один из алгоритмов слияния - «Разделяй и властвуй» [3]. Алгоритмы слияния предполагают разделение множества точек на подмножества, построение триангуляции, затем объединение этих подмножеств в одно целое. При триангуляции поверхности полиэдр будет рассматриваться как граф.

Эта программа будет иметь широкое применение как в химии для расчёта объёмов молекул, так и в других областях, где необходимо нахождение объёма пустот физических тел.

Литература

1. Губайдуллин И.М., Сабиров Д.Ш., Саитгалина А.Д. Параллельная реализация программы для вычисления объема молекул фуллеренов// Международная научная конференция Параллельные вычислительные технологии 2012. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2012, С. 720.
2. А. Д. Саитгалина, Д. Ш. Сабиров, И. М. Губайдуллин Реализация программных комплексов для анализа реакционной способности молекул фуллеренов//Журнал СВМО. 2009. Т. 11, №2
3. А.В. Скворцов Триангуляция Делоне и её применение. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. – 7 С.