

## Программа «Moments of inertia» для расчёта моментов инерции вращательного движения молекул

© Коверда<sup>1+</sup> Михаил Николаевич, Коверда<sup>2</sup> Анна Александровна  
и Офицеров<sup>1\*</sup> Евгений Николаевич

<sup>1</sup> Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов. Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия.

Тел.: (495) 978-32-61. E-mail: [m.kov@pm.me](mailto:m.kov@pm.me)

<sup>2</sup> Кафедра органической и аналитической химии. Ярославский государственный технический университет. Московский пр-т, 88. г. Ярославль, 150023. Россия. Тел.: (4852) 44-05-29.

E-mail: [a.koverda@pm.me](mailto:a.koverda@pm.me)

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** момент инерции вращательного движения, вычислительная химия.

### Аннотация

Момент инерции вращательного движения  $I$  как дескриптор пространственной структуры молекулы, определяющий свойства вещества, в соответствии с работами последних лет начинает приобретать значимость при исследовании зависимостей «структура – свойство», позволяя описать изменение свойств соединений в гомологических рядах и подойти к решению вопроса различия свойств чётных и нечётных гомологов. Проблема заключается в том, что отсутствует универсальный и прозрачный способ расчёта моментов инерции вращательного движения молекул. Исследователи пытаются решить данную проблему различными способами: представлением молекулы в виде её углеродной цепи и расчётом моментов инерции только для неё, пренебрегая вкладом остальных атомов, ручным расчётом моментов инерции для небольших несложных молекул, исходя из их предполагаемой геометрии, извлечением промежуточных результатов из квантовохимических расчётов программных пакетов, таких как Gaussian или Gamess. Нами разработана программа для точного расчёта моментов инерции, использующая задание точной геометрии молекулы в трёхмерном пространстве при помощи декартовых координат. Программа написана на языке Perl и доступна под лицензией GNU General Public License v3.0 (свободное программное обеспечение). В качестве исходных данных программа использует файлы формата XYZ. Принцип работы программы заключается в итеративном расчёте моментов инерции для всех возможных положений в пространстве оси вращения, проходящей через центр массы рассчитываемой молекулы. Полученные в ходе расчёта минимальное и максимальное значения моментов инерции соответствуют двум перпендикулярным осям вращения молекулы ( $x$  и  $z$ ). Момент инерции относительно третьей оставшейся оси  $y$  рассчитывается после нахождения канонического уравнения прямой оси, перпендикулярной найденным осям  $x$  и  $z$ .