

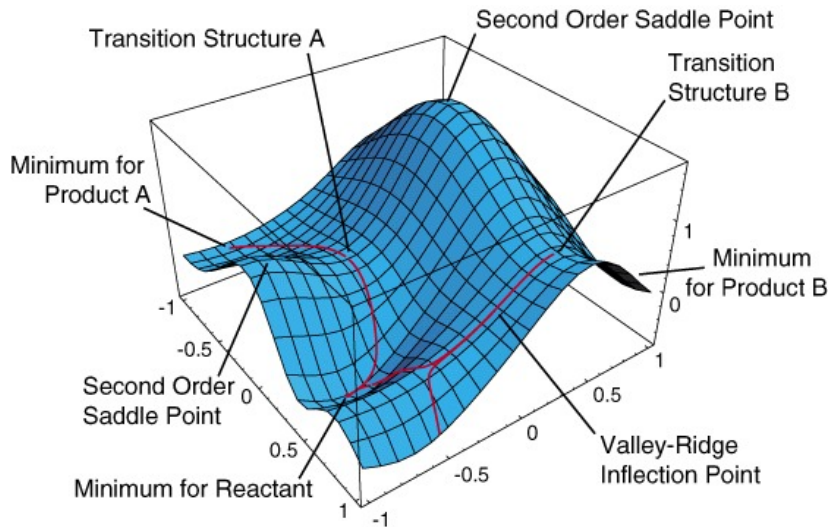
Исследование поверхности потенциальной энергии молекул. Поиск переходных состояний.

Новиков Георгий

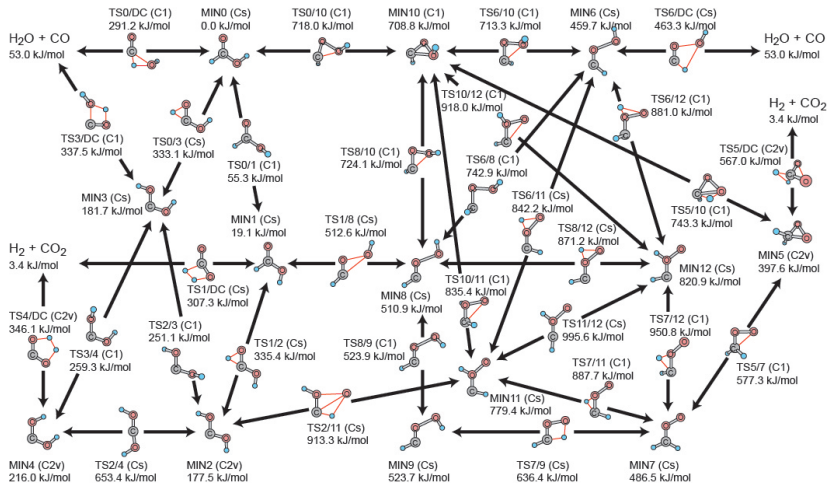
Научный руководитель:
Рязанцев Михаил Николаевич
СПБАУ РАН, (Академический университет), с.н.с. лаборатории
нанобиотехнологий

2017

Поверхность потенциальной энергии

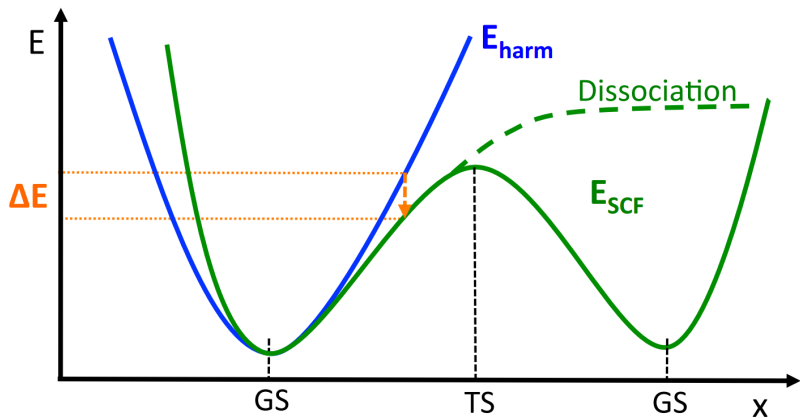


Global Reaction Route Mapping

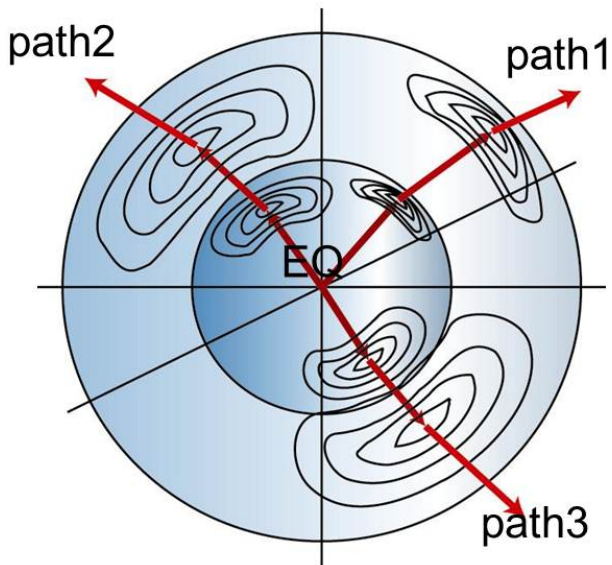


Global Reaction Route Map of HCOOH

Scaled Hypersphere Search



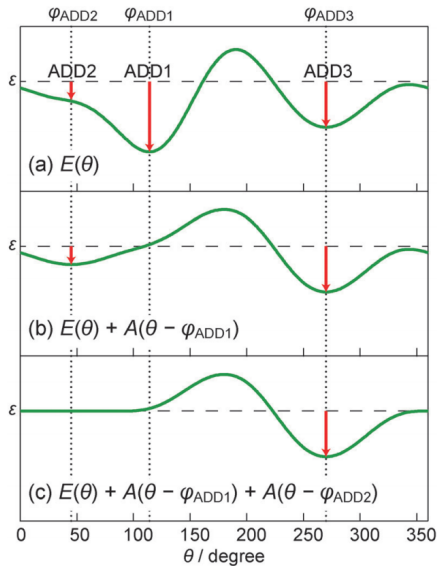
Scaled Hypersphere Search



Результаты

1. Распараллелено
2. Поиск всех точек минимума на первой сфере

Minima elimination technique



Энергия относительно положения равновесия

$$E(x) = E_0 + x^T \nabla E + \frac{x^T H(E) x}{2} + O(\|x\|^3)$$

$$\begin{cases} \nabla E = 0 \\ H(E) = I \end{cases}$$

$$E_r(x) = E_0 + \frac{r^2}{2} + O(\|x\|^3)$$

Добавка

Для общей энергии:

$$Suppl(x) = c_1(x_0^T x)^3$$

Для сферы:

$$A(\theta - \varphi_0) = c_2 \cos^3(\theta - \varphi_0)$$