



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):

2025688726

Дата регистрации: 22.10.2025

Номер и дата поступления заявки:

2025687177 09.10.2025

Дата публикации и номер бюллетеня:

22.10.2025 Бюл. № 11

Автор(ы):

Мезенцев Игорь Александрович (RU),

Лосев Тимофей Валерьевич (RU),

Кольцов Александр Юрьевич (RU),

Меликянц Давид Георгиевич (RU)

Правообладатель(и):

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (RU)

Название программы для ЭВМ:

Модуль генерации зарядов для полимерных молекул на основе фрагментации

Реферат:

Программа позволяет выполнять задачу параметризации зарядовой компоненты силовых полей полимеров на основе квантовохимических данных через фрагментацию макромолекул. В программе используется алгоритм для разрезания молекул на фрагменты произвольного размера с возможностью выбора радиуса обрезки. В работе программы используются данные, получаемые при помощи иных модулей разрабатываемой Цифровой платформы для материаловедения, а также реализованы функции, позволяющие проводить параметризацию из заранее рассчитанных данных. Тип ЭВМ: IBM PC - совмест. ПК; ОС: Windows 10, Ubuntu 18.

Язык программирования: Python

Объем программы для ЭВМ: 124 КБ