

СРАВНЕНИЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА

А.Н. Панченко, студент

Волгоградский государственный университет

(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-5-5-54-57

Аннотация. В данной статье рассматриваются полуэмпирические методы расчета: РМЗ, РМ6, АМ1. Рассмотрены достоинства и недостатки данных методов. АМ1 предлагает скорость и универсальность, но жертвует некоторой точностью, в то время как РМЗ повышает точность при сохранении вычислительной эффективности. РМ6 дополнительно повышает точность, особенно для систем с переходными металлами и биохимических систем. Выбор метода зависит от целей исследования, размера системы и желаемой точности. Для сравнения представлены результаты расчета молекулы 2-нитродифениламина. Выполнены расчеты оптимизации геометрии, энергии связи, ширины запрещенной зоны, ИК-спектра, времени расчета.

Ключевые слова: полуэмпирические методы расчета, РМЗ, РМ6, АМ1, молекула 2-нитродифениламина, ширина запрещенной зоны, энергия связи, оптимизация геометрии, ИК-спектр.

Полуэмпирические методы расчета играют решающую роль в вычислительной химии, обеспечивая ценную информацию о молекулярных структурах, свойствах и реакциях. Эти методы предлагают баланс между точностью и вычислительной стоимостью, что делает их незаменимыми инструментами в различных областях исследований [1-4].

Метод АМ1 – один из первых полуэмпирических методов, разработанный Джеймсом Дж.П. Стюартом в конце 1980-х годов. Это параметризованный вариант теории Хартри-Фока, ориентированный на расчеты органических соединений и переходных металлов. АМ1 использует набор настраиваемых параметров, которые позволяют воспроизводить экспериментальные данные, что делает его очень универсальным для различных молекулярных систем. Расчеты АМ1 значительно быстрее, чем методы *ab initio*, что позволяет изучать более крупные системы и проводить более масштабные молекулярно-динамические моделирования. Данный метод обеспечивает разумную точность для широкого спектра органических и неорганических молекул. АМ1 особенно эффективен для прогнозирования молекулярной геометрии и оптимизации молекулярных структур, облегчая дальнейший анализ. Хотя АМ1

обеспечивает хороший баланс между точностью и вычислительной стоимостью, он менее точен, чем высокоуровневые методы *ab initio*. Он может проявлять отклонения в предсказании определенных свойств, таких как энергия диссоциации связи и барьеры реакции. Применимость АМ1 к большим молекулам и комплексам переходных металлов может быть ограничена. Точность результатов для систем, содержащих тяжелые элементы или необычную связь, может быть поставлена под угрозу.

Метод РМЗ разработан Яном Альмлофом и другими в начале 1990-х годов, является расширением АМ1, которое включает в себя дополнительные параметры и усовершенствования. Он направлен на повышение точности вычислений АМ1 при сохранении вычислительной эффективности. РМЗ широко используется для изучения широкого круга молекулярных систем, включая металлоорганические соединения, полимеры и биомолекулы. РМЗ включает дополнительные параметры, которые улучшают описание электронной структуры, что приводит к более точному прогнозированию молекулярных свойств, таких как теплота образования, энергия реакции и молекулярная геометрия. РМЗ обеспечивает хорошую точность для различных классов молекул, включая как ор-

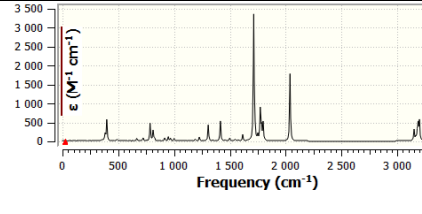
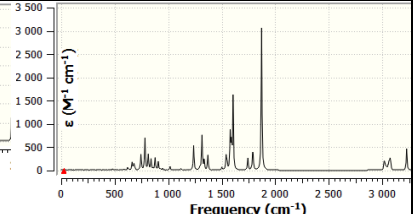
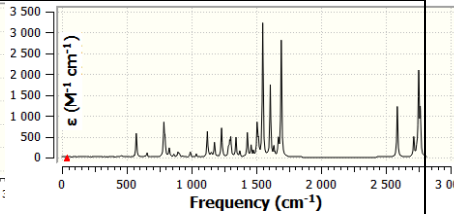
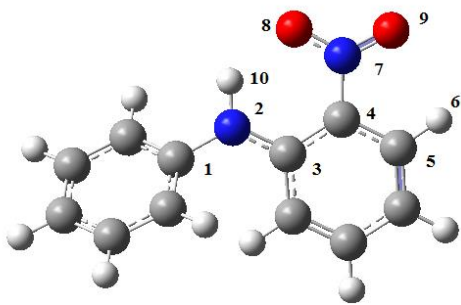
ганические, так и неорганические соединения. Он может работать со сложными системами, включающими множество функциональных групп и тяжелых атомов. РМЗ обеспечивает баланс между точностью и вычислительной стоимостью, позволяя достаточно быстро выполнять вычисления даже для больших систем. Подобно АМ1 метод РМЗ может иметь ограничения при применении к комплексам переходных металлов из-за проблем с точным представлением их электронной структуры. РМЗ опирается на параметры, подогнанные под экспериментальные данные, поэтому его производительность сильно зависит от тренировочного набора. Он может неточно отражать некоторые электронные эффекты или свойства, недостаточно представленные в процессе параметризации.

Метод РМ6 – это расширение метода РМЗ, разработанного Яном Альмлофом и его коллегами в начале 2000-х годов. Он включает дополнительные параметры и модификации для повышения точности и расширения диапазона применимых молекулярных систем. РМ6 специально разработан для улучшения прогнозов для соединений переходных металлов и биомолекулярных систем. РМ6 включает специальные параметры для лучшего описания электронной структуры и свойств комплексов переходных металлов, обеспечивая более высокую точность по сравнению с АМ1 и РМЗ. РМ6 успешно применяется

в различных биохимических системах, включая белки, нуклеиновые кислоты и ферменты. Это может дать ценную информацию об их структуре, стабильности и взаимодействии. Несмотря на повышенную точность, РМ6 сохраняет вычислительную эффективность, характерную для полуэмпирических методов, что позволяет выполнять вычисления в больших системах в разумные сроки. Процесс параметризации РМ6 основан на конкретном обучающем наборе, который может не охватывать все возможные химические среды. Это может привести к неточностям в определенных случаях или для молекул, выходящих за рамки обучающей выборки. Точность РМ6 имеет тенденцию к снижению с увеличением размера молекулы, что делает его менее подходящим для больших систем или макромолекул. РМ6 хорошо проявляет себя по многим свойствам, он все еще может испытывать трудности с точным прогнозированием энергии разрыва связи и барьером реакции, особенно для сложных реакций, включающих несколько стадий.

Далее представлены результаты расчета молекулы 2-нитродифениламина [5] с помощью описанных методов. Была оптимизирована геометрия молекулы, рассчитана энергия связи, ширина запрещенной зоны, представлены ИК-спектры, приведено время расчета. Данные расчетов показаны в таблице 1.

Таблица 1. Основные характеристики молекулы 2-нитродифениламина

Метод расчета		
AM1	PM3	PM6
Энергия связи, эВ.		
-13,83	-14,11	-14,19
Ширина запрещенной зоны, эВ		
7,86	7,787	7,784
Время расчета, с		
7,3	7,4	7,7
ИК-спектр		
		
Геометрические параметры: длина связи, Å		
		
R ₁₋₂ =1,4; R ₂₋₃ = 1,37; R ₃₋₄ =1,43; R ₄₋₅ = 1,42 R ₅₋₆ =1,1; R ₄₋₇ = 1,479 R ₇₋₈ = 1,2; R ₇₋₉ =1,2 R ₂₋₁₀ =1,0	R ₁₋₂ = 1,446; R ₂₋₃ =1,416; R ₃₋₄ = 1,419; R ₄₋₅ = 1,409; R ₅₋₆ = 1,09; R ₄₋₇ = 1,48; R ₇₋₈ =1,225; R ₇₋₉ =1,21; R ₂₋₁₀ =1,09	R ₁₋₂ = 1,44; R ₂₋₃ = 1,38; R ₃₋₄ = 1,429; R ₄₋₅ = 1,423; R ₅₋₆ = 1,09; R ₄₋₇ = 1,447; R ₇₋₈ = 1,235; R ₇₋₉ =1,22; R ₂₋₁₀ =1,04

Закключение: AM1, PM3 и PM6 – это три популярных полуэмпирических метода расчета, которые обеспечивают баланс между вычислительной эффективностью и точностью. AM1 широко используется для рутинных расчетов и геометрической оптимизации, предлагая универсальность и скорость, но за счет снижения точности для определенных свойств и систем. PM3 улучшает точность AM1, сохраняя при

этом вычислительную эффективность, что делает его пригодным для широкого спектра молекулярных систем. PM6 дополнительно повышает точность, особенно для соединений переходных металлов и биохимических систем, но его производительность может быть ограничена размером молекулы и наличием комплексного обучающего набора.

Библиографический список

1. Нанотубулярные композиты и их полуэмпирические исследования / И.В. Запорожкова, Е.В. Первалова, Е.В. Прокофьева, О.А. Давлетова // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2006. – № 2. – С. 4-14.
2. The semi-empirical research of the adsorption of biologically active molecules on the outer surface of carbon nanotubes / A.A. Kravchenko, T.A. Ermakova, O.A. Davletova [et al.] // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. – 2014. – Vol. 5, № 1. – P. 98-100.
3. 06.16-19A.21K Полуэмпирические расчетные методы квантовой химии // РЖ 19АБ-1. Общие вопросы химии. Физическая химия (Строение молекул). – 2006. – № 16.
4. Панченко, А.Н. Квантово-химические исследования получения композита на основе полимера-пиролизованного полиакрилонитрила / А.Н. Панченко, И.А. Какорин // Между-

народный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2022. – № 6-2(69). – С. 10-12. – DOI 10.24412/2500-1000-2022-6-2-10-12.

5. Панченко, А.Н. Теоретические исследования состава следов продуктов выстрела с помощью наноструктур / А.Н. Панченко // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2023. – № 4-4(79). – С. 186-189. – DOI 10.24412/2500-1000-2023-4-4-186-189.

COMPARISON OF SEMI-EMPIRICAL CALCULATION METHODS

A.N. Panchenko, *Student*
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

Abstract. *This article discusses semi-empirical calculation methods: PM3, PM6, AM1. The advantages and disadvantages of these methods are considered. The AM1 offers speed and versatility, but sacrifices some accuracy, while the PS3 improves accuracy while maintaining computational efficiency. PM6 further improves accuracy, especially for transition metal systems and biochemical systems. The choice of method depends on the objectives of the study, the size of the system and the desired accuracy. For comparison, the results of the calculation of the 2-nitrodiphenylamine molecule are presented. Calculations of optimization of geometry, binding energy, band gap width, IR spectrum, calculation time are performed.*

Keywords: *semi-empirical calculation methods, PM3, PM6, AM1, 2-nitrodiphenylamine molecule, band gap, binding energy, geometry optimization, IR spectrum.*