

НОВЫЙ МЕТОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ DFT БОЛЬШИХ МОЛЕКУЛ

Аникин Н.А., Кузьминский М.Б.

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г.Москва

Аникин Н.А.
Кузьминский М.Б.
ИОХ РАН

Предложен новый метод, позволяющий моделировать расчеты DFT больших молекул, и проведена его первичная апробация. Метод использует модельный одноэлектронный гамильтониан (фокиан), аппроксимирующий фокиан современных методов функционала плотности (DFT) в виде, позволяющем кардинально уменьшить расчетное время. По требованиям к объемам вычислительных ресурсов наш метод близок к более грубым полуэмпирическим методам типа PM3, и к модельным методам DFT типа SCC-DFTB [1].

Фокиан предложенного метода состоит из нескольких физически различных членов-операторов: оператор кинетической энергии, кулоновского члена, и обменно-корреляционного потенциала. Эти операторы имеют различную физическую природу и различную зависимость от геометрической и электронной структуры молекулы и составляющих ее атомов и связей. Матрицы оператора кинетической энергии и интегралов перекрывания вычисляются точно; матрица кулоновского оператора (одноэлектронная и двухэлектронная ее части) вычисляются неэмпирически. Матрица обменно-корреляционного оператора аппроксимируется суммой атомных вкладов с использованием эмпирических атомных параметров, что позволило сильно уменьшить время расчета.

Проведен выбор эталонных молекул, включающих молекулярные структуры, типичные для протеинов и докинг-комплексов, и типичные фрагменты наноструктур типа фуллеренов, нанотрубок и т.д. Проведены расчеты первого набора из более чем 5 тысяч таких структур методом PBE в известном минимальном базисе MINI. Для эффективности организовано специализированное хранилище результатов расчетов. На языке Fortran-95 разработана и отлажена программа для подбора указанных эмпирических параметров. Проведена первичная апробация этой программы с подбором параметров атомов H, C, N, O, F, S, Cl.

Апробация показала значительно более хорошее, систематическое воспроизведение матриц фокиана DFT, чем в близком по быстродействию методе SCC-DFTB, и тем более в полуэмпирических методах типа PM3. Это значительно повышает надежность метода по сравнению с альтернативными приближенными методами - SCC-DFTB и полуэмпирическими методами, так как в нашем методе конечные расчетные свойства (электронное распределение, орбитальные и полная энергия, дипольные моменты и т.д.) опираются на систематическую близость нашего фокиана к фокиану DFT, а не на случайное воспроизведение конечных расчетных свойств (что характерно для полуэмпирических методов и отчасти для SCC-DFTB). Одновременно достигается быстродействие на уровне этих альтернативных методов, т.е. на порядки больше, чем в базовом методе DFT.

Работа поддержана РФФИ, проект 11-07-00470.

Литература

1. Zheng G., Lundberg M., Jakowski J., Vreven T., Frisch M.J., Morokuma K. *Int. J. Quant. Chem.*, 2009. v.109, N9. p.1841–1854.