

УДК 544.18

## ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ КВАНТОВОЙ ХИМИИ Методические замечания

**И.А. Петров**

Тверской государственной университет,  
кафедра общей физики

В работе рассматриваются пакеты программ вычислительной квантовой химии: Gaussian, US GAMESS и HyperChem. Даны краткие описания их возможностей, а также требования к аппаратно-программному обеспечению.

Вычислительная химия – это молодая область химии. Её популярности способствовали успехи развития вычислительной техники за последние несколько десятков лет. Вычислительная химия использует программное обеспечение для того, чтобы заглянуть внутрь химического процесса, лучше понять пути протекания реакций и их механизмы на атомарном уровне.

В данной статье анализируются особенности вычислительных квантово-химических пакетов программ Gaussian, US GAMESS и HyperChem.

Программа для исследования электронной структуры Gaussian разрабатывается и поддерживается фирмой Gaussian Inc ([www.gaussian.com](http://www.gaussian.com)). Данная программа является коммерческой. Период разработки новых версий составляет 4–5 лет. Номер версии обычно обозначается годом её выпуска. Небольшие изменения и дополнения также вносятся и в текущую версию, которой присваивается соответствующий номер ревизии, например «Gaussian 98 Revision-A.11.4». В очередной версии обычно реализуется поддержка новых методов, хотя, к сожалению, иногда перестают поддерживаться прекрасные старые методы. Так, в Gaussian 03, выпущенном в 2003 г., отсутствует группа методов AIM (Atoms In Molecules), которая входила в состав Gaussian 98.

Gaussian обладает полным набором стандартных возможностей: расчет энергии, оптимизация структуры, колебательный анализ, расчет химических реакций и вычисление огромного числа свойств соединений. Но наряду со стандартными возможностями, Gaussian обладает рядом особенностей.

Обычно протеины и другие большие молекулы не исследуются электронными методами, но Gaussian 98 и Gaussian 03 представляют группу методов ONIOM, позволяющих изучать такие периодические системы, как кристаллы и полимеры. Gaussian доступен как в форме скомпилированных исполняемых файлов под большинство современных операционных систем (Windows, Linux, Unix, Mac OS), так и в виде исходных кодов.

Версии Gaussian для Linux и Macintosh являются персональными. Они функционируют на обычном настольном персональном компьютере. Требования к аппаратной конфигурации компьютера зависят от сложности решаемых задач, т.е. от размеров исследуемой системы и метода исследования. К сожалению, реализация параллельных вычислений в версии Gaussian для операционных систем семейства Windows не предусмотрена.

Для профессиональных исследований в области вычислительной квантовой химии, как правило, используют либо готовые многопроцессорные решения, предлагаемые фирмами IBM, Hewlett-Packard, Intel, Sun и многими другими, либо кластерные решения собственной сборки.

Для реализации параллельных вычислений в Gaussian требуется дополнительный пакет TCP Linda и специальная версия Gaussian, поддерживающая параллельные вычисления в многопроцессорной среде с распределенной памятью.

Gaussian Inc. предлагает прекрасную программу визуализации GaussView, позволяющую создавать и редактировать трехмерные модели молекулярных структур. GaussView также формирует файлы с расчетным заданием и запускает их на выполнение. Следует отметить, что выходные файлы Gaussian – \*.chk (checkpoint файл) и \*.fch (форматированный checkpoint файл) совместимы с популярным пакетом визуализации молекулярных структур ChemOffice. Программа Chem3D, входящая в состав этого пакета, позволяет также формировать файлы с заданием, но, к сожалению, набор поддерживаемых параметров весьма ограничен.

US GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) – это программа *ab initio* молекулярной квантовой химии. Данная программа поддерживается исследовательской группой из Университета Айовы (США) [1]. Существуют также версии UK GAMESS, разрабатываемая фирмой «Computing for Science Ltd» (Великобритания), и PC GAMESS, разрабатываемая в Московском государственном университете. US GAMESS и PC GAMESS являются полностью бесплатными, UK GAMESS – коммерческий программный продукт. US GAMESS может вычислять полный набор волновых функций: RHF, ROHF, UHF, GVB, и MCSCF. Доступны также методы, реализующие корреляционные поправки: метод конфигурационного взаимодействия, MP2, методы функционала плотности. US GAMESS способен вычислять множество различных молекулярных свойств.

Версии US GAMESS обозначаются датой выпуска. За год обычно выходит несколько новых версий. Каждая новая версия не только содержит исправления, но и включает в себя расширения прежних возможностей, а также поддержку новых методов.

US GAMESS доступен как в виде скомпилированных исполняемых файлов для ряда операционных систем, так и в виде исходных кодов на языках Fortran и C. Разработчики рекомендуют использовать для работы с US GAMESS операционные системы семейства Linux, в частности широко распространенный дистрибутив Red Hat. Несмотря на отсутствие официальной поддержки Windows, автору удалось откомпилировать US GAMESS под управлением операционной системы Microsoft Windows XP с помощью набора библиотек CygWin ([www.cygwin.com](http://www.cygwin.com)).

US GAMESS не имеет собственного графического интерфейса. Существует ряд программ, способных формировать входные и интерпретировать выходные файлы US GAMESS. Программа «Chemical-

GMS», созданная в университете штата Айова (США), позволяет создавать модели молекулярных структур и формировать вычислительные задания GTK-Gamess.

Программа HyperChem ([www.hyper.com](http://www.hyper.com)), выпускаемая фирмой Hypercube Inc., является прекрасным инструментом для изучения вычислительной химии. HyperChem обладает удобным графическим интерфейсом, позволяющим создавать и редактировать модели молекулярных структур от самых простых до сложнейших белковых соединений. Встроенные средства позволяют проводить расчетные исследования методами молекулярной механики, полуэмпирическими методами и методами *ab initio*.

Существует несколько вариантов HyperChem, обладающих различной функциональностью. «HyperChem Professional Release» ориентирован на профессионалов и обладает наибольшей функциональностью. «Student HyperChem» имеет ограничения по числу атомов в исследуемой системе и предназначена для изучения вычислительной химии. «Pocket HyperChem» – первая в своей области программа, позволяющая выполнять вычисления полуэмпирическими методами и обеспечивать визуализацию молекулярных структур на так называемых карманных компьютерах. «HyperChem Professional Release» и «Student HyperChem» функционируют под управлением операционных систем Windows 98/2000/XP. Для работы с «Pocket HyperChem» требуется карманный компьютер с ОС Windows CE.

Отдельно хочется отметить превосходно сделанную документацию HyperChem. Она включает в себя не только иллюстрированное описание интерфейса пользователя, но и краткое теоретическое описание реализованных в программе методов. HyperChem, несомненно, окажется правильным выбором для начинающих изучать вычислительную химию. Невозможно, на наш взгляд дать однозначный ответ на вопрос относительно преимущества Gaussian над US GAMESS или наоборот. Обе программы имеют богатую историю развития и скорее дополняют друг друга.

#### Список литературы

1. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S., Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Su S., Windus T.L., Dupuis M., Montgomery J.A. General atomic and molecular electronic structure system //J. Comput. Chem. 1993. V. 14. P. 1347–1363.