Semi-empiriniu metodu suskaičijuojama per sekundes vienai konformacijai.

Nebuvau tikras kokio formato įvesties tikimasi, todėl laikinai nustačiau geometrijos skaitymą iš .xyz failo bei multipletiškumas su krūviu nurodomi .py konstantuose.

MOPAC7 AM1 ir NWCHEM b3lyp def2-svpd xfine išvestinių vertes skiriasi iki ~2-3 karto

Pastebėjau kad išvestines galima būtų lyginti reikėjo apkeisti stulpelius x ir y; z ir y dauginti iš -1 (improper rotation?)

Matavimo vienetai unifikuojami angstrem-mol-kJ

mopac7:

1. Vietoje AM1 galėjo būti naudojamas PM3 (naudoti verta kai yra sunkesni atomai kaip Cl), daugiau alternatyvų su mopac7 nelabai yra.
2. Kaip supratau guessus programa parenka pati ir pačiam rinktis nėra opcijos.
3. Spino tuolab nėra prasmės nurodyti.

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| DFT GRADIENTS NWCHEM b3lyp def2-svpd xfine | | | | | | | |
| atom coordinates | | coordinates, A | | | derivatives (kJ/mol/ang) | | |
|  |  | x | y | z | x | y | z |
| 1 | C | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -182.706 | -225.410 |
| 2 | H | 0.000 | 1.080 | 0.000 | 0.000 | -51.753 | 170.402 |
| 3 | H | 1.020 | -0.360 | 0.000 | 15.023 | 107.877 | 209.364 |
| 4 | H | -1.020 | -0.360 | 0.000 | -15.023 | 107.877 | 209.364 |
| 5 | Cl | 0.000 | 0.000 | 1.780 | 0.000 | 18.705 | -363.716 |

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| DFT GRADIENTS MOPAC7 AM1 | | | | | | | |
| atom coordinates | | coordinates, A | | | derivatives (kJ/mol/ang) | | |
|  |  | y | x | z | -y | x | -z |
| 1 | C | 0.000 | 0.000 | 0.000 | 0.000 | -131.577 | -333.855 |
| 2 | H | 0.000 | 1.080 | 0.000 | 0.000 | -149.392 | 169.720 |
| 3 | H | 1.020 | -0.360 | 0.000 | 41.630 | 126.350 | 193.806 |
| 4 | H | -1.020 | -0.360 | 0.000 | -41.630 | 126.237 | 193.807 |
| 5 | Cl | 0.000 | 0.000 | 1.780 | 0.000 | 28.383 | -223.478 |