**Zeo++ 사용법**

Zeo++의 주요 유틸리티는 CLI 기반 터미널에서 작동하며, "network" 바이너리를 실행하여 호출할 수 있습니다. 분석할 재료 구조는 호환 가능한 파일 형식 중 하나로 제공되어야 합니다. 프로그램의 기능에 대한 자세한 문서와 그래픽 사용자 인터페이스(ZeoVis)에 대한 정보는 소스와 함께 제공된 readme 파일을 확인하거나, Maciej Haranczyk에게 직접 문의하십시오.

**Zeo++ 사용 설명 로그 정리**

Zeo++의 주 명령어는 network 바이너리를 사용하여 호출되며, 다양한 기능들을 실행할 수 있습니다. 분석할 물질의 구조는 호환되는 파일 형식(예: .cssr, **.cif** 등)으로 제공되어야 합니다.

**기본 명령어**

* Zeo++ 실행 기본 명령어: ./network [옵션] INPUTFILE
* 입력 파일(INPUTFILE)은 **.cssr, .cif, .cuc, .car, .arc, 또는 .v1** 형식이어야 합니다.

**옵션들**

아래는 Zeo++에서 제공하는 주요 옵션들과 그 기능에 대한 설명입니다.

1. **출력 형식 변환 옵션:**
   * -cssr [outputfile\_cssr]: 입력 파일을 .cssr 형식으로 출력.
   * -cif [outputfile\_cif]: 입력 파일을 .cif 형식으로 출력.
   * -v1 [outputfile\_v1]: 입력 파일을 .v1 형식으로 출력.
   * -xyz [outputfile\_xyz]: 입력 파일을 .xyz 형식으로 출력.
   * -superxyz [outputfile\_xyz]: 입력 파일을 기반으로 한 초격자의 .xyz 형식 출력.
   * -vtk [outputfile\_vtk]: 단위 셀을 .vtk 형식으로 출력.
2. **가시화 옵션:**
   * -vis [outputfile\_vtk/xyz]: 입력 파일 및 초격자의 .xyz 형식과 단위 셀의 .vtk 형식으로 출력.
   * -visVoro probe\_radius [unit\_cell\_shifts: a b c]: 접근 가능한 보로노이 네트워크를 시각화하여 .xyz 및 .vtk 형식으로 출력.
   * -zvis [outputfile\_zvis]: ZeoVis 프로그램에서 네트워크의 중요한 특징을 시각화할 수 있도록 파일 생성.
3. **보로노이 네트워크 옵션:**
   * -nt2 [outputfile\_nt2]: 보로노이 네트워크를 .nt2 형식으로 출력.
   * -r [radfile]: 원자 반경을 사용하여 보로노이 분해를 수행. .rad 파일을 통해 반경을 설정할 수 있으며, 설정하지 않으면 기본 반경을 사용.
   * -nor: 원자 반경을 사용하지 않고 표준 보로노이 분해 수행.
4. **반지름과 질량 정의 옵션:**
   * -mass [massfile]: 기본 질량 테이블 대신 사용자가 제공한 .mass 파일을 사용하여 원자의 질량을 정의.
5. **기하학 분석 옵션:**
   * -res [outputfile\_res]: 가장 큰 포함된 구의 직경, 자유 구의 직경 및 자유 구 경로상의 포함된 구의 직경을 계산하여 출력.
   * -resex [outputfile\_res]: 확장된 출력으로, a, b, c 축을 따라 자유 구 및 포함 구의 직경도 출력.
6. **표면적 및 부피 계산 옵션:**
   * -sa chan\_radius probe\_radius num\_samples [outputfile\_sa]: 접근 가능한 표면적을 계산.
   * -vol chan\_radius probe\_radius num\_samples [outputfile\_vol]: 접근 가능한 부피를 계산.
   * -volpo chan\_radius probe\_radius num\_samples [outputfile\_vol]: 프로브-점유 가능한 부피 계산.
   * -psd chan\_radius probe\_radius num\_samples [outputfile\_psd]: 기공 크기 분포를 계산.
7. **채널 분석 및 차단 구체 옵션:**
   * -chan probe\_radius [outputfile\_chan]: 주어진 반지름을 가진 프로브로 접근할 수 있는 채널 분석.
   * -block probe\_radius num\_samples: 차단 구체를 계산하여 MC 시뮬레이션에 사용할 수 있도록 RASPA 형식으로 출력.
8. **거리 그리드 및 구조 분석 옵션:**
   * -gridBOV: 거리 그리드를 BOV 형식으로 출력.
   * -gridG: 거리 그리드를 Gaussian Cube 형식으로 출력.
   * -gridGBohr: 거리 그리드를 Bohr 단위로 변환하여 Gaussian Cube 형식으로 출력.
   * -strinfo input\_structure.cssr: 구조 분석 정보를 제공하며, 연결성과 프레임워크 차원을 분석.
   * -oms input\_structure.cssr: 제공된 MOF 구조에서 Open Metal Site (OMS) 카운트.
9. **기타 옵션:**
   * -ray\_atom chan\_radius probe\_radius num\_samples [outputfile\_ray]: 무작위로 설정된 위치에서 시작하여 원자를 향해 광선을 쏘는 방식으로 히스토그램을 생성.
   * -sphericalSubstructures probe\_radius sphere\_radius [element\_type]: 구형 하위 구조를 .xyz 파일 형식으로 출력.

* 각 분석에 대한 결과 파일은 명시적으로 지정되지 않으면 기본적으로 inputfile.(feature\_name) 형식으로 저장됩니다.

**Zeo++의 기본 기능 예제**

소개되는 여러 예제는 빠르게 배울 수 있는 학습 자료로 사용할 수 있습니다. 각 섹션에서는 특정 기능을 호출하기 위해 필요한 일반적인 구문(예: 기공 직경 또는 접근 가능한 부피 계산)을 다루며, 그 후 EDI 제올라이트의 구체적인 예시를 제공합니다. EDI 제올라이트의 CSSR 파일은 https://www.zeoplusplus.org/examples/EDI.cssr 다운로드하여 즉시 테스트할 수 있습니다.

시작하기 전에 일반적인 계산에서 **Zeo++는 관련된 원자의 반지름과 질량을 알아야 합니다**. 모든 원소에 대한 질량과 반지름이 이미 인코딩되어 있습니다. **반지름의 경우, Cambridge Crystallography Data Center(CCDC)에서 제공하는 세트가 기본으로 구현되어 있으며 기본값으로 사용**됩니다. 그러나 경우에 따라 분석할 시스템에 이름이 알려진 원소와 일치하지 않는 원자가 있을 수 있습니다(예: "Atm1" 또는 "N12"). 또는 기본값을 재정의해야 하는 경우가 있습니다. 이러한 경우, 사용자는 추가 파일을 제공하여 반지름과 질량을 정의할 수 있습니다. 그렇지 않으면 코드를 추가로 "-nomass" 및/또는 "-nor" 매개변수와 함께 실행해야 합니다.

질량 및 반지름 파일의 형식은 간단합니다. 각 줄에는 두 개의 열이 있으며, 각각 원자 이름과 해당하는 질량 또는 반지름이 지정됩니다. 실행 중에 각각 "mass.mass"와 "rad.rad" 파일을 지정하여 사용합니다:  
./network -r rad.rad -mass mass.mass ...

분석할 구조 파일은 종종 분자 시뮬레이션에서 직접 가져오며, 예를 들어 "O\_12" 또는 "N12"와 같이 확장된 원자 이름을 사용합니다. 각 이름에 대해 필요한 반지름을 제공하는 것은 번거로울 수 있습니다. 다행히도, Zeo++는 다음 인수를 사용하면 원자 이름 뒤에 오는 모든 추가 문자를 제거할 수 있습니다: ./network -stripatomnames ...

주의: Zeo++에 구현된 알고리즘의 대부분은 Voronoi 분해에 의존하며, 원자의 반지름을 사용하여 수행될 수 있습니다. 기본적으로 반지름이 사용되며, Voronoi 분해는 근사적으로 처리됩니다. 후자는 시스템에 반지름이 다른 원자가 포함되어 있는 경우 예측된 기공 직경과 기공 접근성에 오류를 일으킬 수 있습니다. 이러한 경우, 최대 오류를 0.1Å 미만으로 줄일 수 있는 추가 "-ha" 매개변수를 사용하는 것을 권장합니다. 또는 "-nor" 매개변수를 사용하여 모든 원자의 반지름을 0으로 설정하는 점 입자 근사를 사용할 수 있습니다.

아래에서 설명하는 예시는 모두 기본 CCDC 반지름을 사용하여 실행됩니다. 모든 규산질 제올라이트 EDI의 경우, O와 Si 원자의 반지름은 각각 1.52Å와 2.1Å입니다. 따라서 높은 정확도의 "-ha" 플래그가 사용됩니다.

**기공 직경**  
가장 큰 포함된 구, 자유 구, 그리고 자유 구 경로를 따라 포함된 구의 직경을 계산하려면 다음 구문을 사용하십시오:

./network -ha -res output\_file.res input\_structure.cssr

결과적으로 output\_file.res 파일이 작성됩니다. 이 파일에는 **각각 가장 큰 포함된 구, 가장 큰 자유 구, 자유 구 경로를 따라 포함된 구의 직경이 포함된 세 개의 숫자가** 기록됩니다. 사실, output\_file.res라는 파일명은 선택 사항입니다. 파일명이 제공되지 않으면 결과는 input\_structure.res에 기록됩니다.

어떤 값이 PLD, LCD일까?

예시 : ./network -ha -res EDI.cssr

위 명령어는 EDI.res 파일에 다음과 같은 결과를 출력합니다:

EDI.res 4.89082 3.03868 4.81969

첫 번째 열에 포함된 파일명은 불필요해 보일 수 있지만, 수백 개의 .res 파일이 큰 데이터 파일로 병합될 때 **매우 유용**합니다. (예: cat \*.res > final\_results\_table.txt). 출력 파일명을 변경할 수도 있습니다. 예를 들어, 다음 매개변수를 사용하면 결과가 EDI\_output.res 파일에 기록됩니다:

./network -ha -res EDI\_output.res EDI.cssr

또한, **각 결정학적 방향의 가장 큰 자유 구와 포함된 구 직경을 출력하는** 확장된 출력 옵션인 -resex도 사용할 수 있습니다 (자세한 내용은 Zeo++ 원본 출판물을 참조하십시오).

**채널 식별 및 차원성**  
주어진 반지름을 가진 구형 탐침(probe\_radius)에 대해 Zeo++는 해당 탐침이 접근할 수 있는 빈 공간을 분석할 수 있습니다. 식별된 각 채널 시스템은 차원성 및 Di, Df, Dif로 특징지어집니다. 사용 구문은 다음과 같습니다:

./network -chan probe\_radius input\_structure.cssr

CO2에 대략적으로 해당하는 반지름 1.5Å의 탐침에 대한 예시 분석:

./network -ha -chan 1.5 EDI.cssr

위 명령은 EDI.chan 파일에 다음과 같은 결과를 저장합니다:

EDI.chan 1 channels identified of dimensionality 1

Channel 0 4.89082 3.03868 4.89082

기본 출력 파일명(여기서는 EDI.chan)은 다른 파일명으로 변경할 수 있습니다. 예를 들어, 다음 매개변수를 사용하면 결과가 EDI\_output.chan 파일에 기록됩니다

./network -ha -chan 1.5 EDI\_output.chan EDI.cssr

**표면적**  
Zeo++는 반지름이 probe\_radius인 구형 탐침에 접근할 수 있는 표면적을 계산할 수 있습니다(정확히 말하자면, 탐침의 중심이 접근할 수 있는 표면적을 의미합니다). 이 계산은 두 단계로 수행됩니다. 첫 번째로, 기공의 접근 가능성이 결정됩니다. 그 다음, 몬테카를로 샘플링 절차가 표면적을 적분하는 데 사용됩니다. 두 단계에서 사용되는 반지름은 동일하지 않아도 되지만, 아래에서 논의되는 몇 가지 제한이 있습니다. 구문은 다음과 같습니다:

./network -sa chan\_radius probe\_radius num\_samples outputfile.sa input\_structure.cssr

여기서 chan\_radius는 빈 공간의 접근 가능성을 결정하는 데 사용되는 탐침의 반지름입니다. probe\_radius는 표면을 샘플링하는 데 사용되는 몬테카를로 탐침의 반지름입니다(probe\_radius는 chan\_radius보다 같거나 작아야 하며, 동일하게 설정하는 것이 권장됩니다). 변수 num\_samples는 각 원자당 몬테카를로 샘플의 개수를 설정합니다. outputfile.sa는 결과가 기록될 파일의 이름으로, 생략하면 기본적으로 input\_structure.sa에 결과가 기록됩니다.

반지름 1.2Å인 탐침에 대해 접근 가능한 표면적을 계산하는 예시 분석(다시 말하지만, chan\_radius와 probe\_radius를 동일하게 설정하는 것이 권장됨):

./network -ha -sa 1.2 1.2 2000 EDI.cssr

위 명령은 EDI.sa 파일에 다음과 같은 내용을 저장합니다:

@ EDI.sa Unitcell\_volume: 307.484 Density: 1.62239

ASA\_A^2: 60.7713 ASA\_m^2/cm^3: 1976.4 ASA\_m^2/g: 1218.21

NASA\_A^2: 0 NASA\_m^2/cm^3: 0 NASA\_m^2/g: 0

여기서 접근 가능한 표면적(ASA)과 접근 불가능한 표면적(NASA, 접근 불가능한 주머니 내부의 표면적에 해당)은 각각 서로 다른 단위로 제공됩니다(각각 단위 셀당 표면적, 부피(입방 cm)당 제곱미터 단위의 표면적, 물질의 질량(g)당 제곱미터 단위의 표면적). 출력은 "@"로 시작하는 한 줄로 형식화되어 있으며, 여러 출력 파일을 하나의 요약 파일로 변환하는 작업을 쉽게 할 수 있도록 되어 있습니다. 예를 들어, 다음 명령을 사용하여 요약 파일을 만들 수 있습니다:

grep "@" \*.sa > final\_summary\_file.txt

새로운 버전의 Zeo++는 표면적에 대한 추가 정보를 제공합니다. 각각의 채널과 포켓에 대한 ASA와 NASA의 기여도가 출력됩니다.

Number\_of\_channels: 1 Channel\_surface\_area\_A^2: 60.7713

Number\_of\_pockets: 0 Pocket\_surface\_area\_A^2:

**접근 가능한 부피 (Accessible volume)**  
여기서 접근 가능한 부피는 구형 탐침의 중심이 접근할 수 있는 부피로 정의됩니다. 접근 가능한 부피를 계산하는 명령의 구문은 표면적 계산 구문과 유사합니다(앞서 설명한 대로 chan\_radius와 probe\_radius를 동일하게 유지하는 것이 권장됩니다):

./network -vol chan\_radius probe\_radius num\_samples outputfile.vol input\_structure.cssr

그러나 이 경우 num\_samples 변수는 단위 셀당 몬테카를로 샘플의 개수를 설정합니다. outfile.vol 매개변수는 결과가 기록될 파일의 이름이며, 선택적입니다.

반지름이 1.2Å인 탐침에 대해 접근 가능한 부피를 계산하는 예시:

./network -ha -vol 1.2 1.2 50000 EDI.cssr

위 명령은 EDI.vol 파일에 다음과 같은 결과를 기록합니다:

@ EDI.vol Unitcell\_volume: 307.484 Density: 1.62239

AV\_A^3: 22.6493 AV\_Volume\_fraction: 0.07366 AV\_cm^3/g: 0.0454022

NAV\_A^3: 0 NAV\_Volume\_fraction: 0 NAV\_cm^3/g: 0

여기서 접근 가능한 부피(AV)와 접근 불가능한 부피(NAV, 접근 불가능한 포켓의 부피에 해당)는 각각 세 가지 단위로 제공됩니다: 단위 셀당 부피, 공극률, 물질의 질량(g)당 부피(입방 cm 단위). 마찬가지로 표면적 계산의 출력과 유사하게, 출력 형식은 "@"로 시작하는 한 줄로 구성되어 있습니다.

새로운 Zeo++ 버전은 접근 가능한 부피에 대한 추가 정보를 제공합니다. 각각의 채널과 포켓에 대한 AV와 NAV의 기여도가 출력됩니다

Number\_of\_channels: 1 Channel\_volume\_A^3: 22.6493

Number\_of\_pockets: 0 Pocket\_volume\_A^3:

**탐침 점유 가능 부피 (Probe-occupiable volume)**  
탐침 점유 가능 부피 계산은 탐침이 접근할 수 있는 물질의 부피를 재정의하는 개념입니다. 이는 사용된 구형 탐침의 전체 부피를 고려하며, 자세한 내용은 해당 문서의 문서 탭에 나와 있는 관련 논문을 참조하십시오. 탐침 점유 가능 부피를 계산하는 명령의 구문은 접근 가능한 부피 계산 구문과 유사하며(앞서 설명한 대로 chan\_radius와 probe\_radius를 동일하게 유지하는 것이 권장됩니다):

./network -volpo chan\_radius probe\_radius num\_samples outputfile.vol input\_structure.cssr

여기서 num\_samples 변수는 단위 셀당 몬테카를로 샘플의 개수를 설정합니다. outfile.volpo 매개변수는 결과가 기록될 파일의 이름이며, 선택적입니다.

반지름이 1.2Å인 탐침에 대해 탐침 점유 가능 부피를 계산하는 예시:

./network -ha -volpo 1.2 1.2 50000 EDI.cssr

위 명령은 EDI.volpo 파일에 다음과 같은 결과를 기록합니다:

@ EDI.volpo Unitcell\_volume: 307.484 Density: 1.62239

POAV\_A^3: 131.284 POAV\_Volume\_fraction: 0.42696 POAV\_cm^3/g: 0.263168

PONAV\_A^3: 0 PONAV\_Volume\_fraction: 0 PONAV\_cm^3/g: 0

여기서 접근 가능한 탐침 점유 가능 부피(POAV)와 접근 불가능한 탐침 점유 가능 부피(PONAV, 접근 불가능한 포켓의 부피에 해당)는 각각 세 가지 단위로 제공됩니다: 단위 셀당 부피, 공극률, 물질의 질량(g)당 부피(입방 cm 단위). 표면적 계산의 출력과 유사하게, 출력 형식은 "@"로 시작하는 한 줄로 구성되어 있으며, UNIX 스크립팅에서 grep 명령을 사용하여 쉽게 검색할 수 있도록 설계되었습니다.

**공극 크기 분포 (Pore size distribution)**  
공극 크기 분포 히스토그램을 계산하는 명령의 구문은 접근 가능한 부피 계산과 유사합니다(앞서 언급한 대로 chan\_radius와 probe\_radius를 동일하게 유지하는 것이 권장됩니다).

./network -psd chan\_radius probe\_radius num\_samples outputfile.psd input\_structure.cssr

여기서 num\_samples 변수는 단위 셀당 몬테카를로 샘플의 개수를 설정합니다. outfile.psd 매개변수는 결과가 기록될 파일의 이름이며 선택적입니다.

반지름이 1.2Å인 탐침을 사용하여 공극 크기 분포를 계산하는 예시:

./network -ha -psd 1.2 1.2 50000 EDI.cssr

위 명령은 공극 크기 분포 히스토그램이 포함된 EDI.psd\_histo 파일을 생성합니다. 일반적으로 히스토그램 파일의 네 번째 열에 있는 "도함수 분포"(탐침 크기에 따른 접근 가능한 부피 변화)가 분석됩니다. 기본적으로 히스토그램은 1000개의 0.1Å 크기의 bin을 가지며, 이러한 설정을 변경하려면 소스 코드를 수정해야 합니다.

**경고**: 최근에 공극 크기 분포(PSD) 알고리즘에서 결함이 발견되었습니다. 이는 탐침 직경이 물질의 원자 크기보다 훨씬 작은 경우 PSD 피크 위치의 정확도가 감소하는 문제를 야기합니다(예: 직경 0.01Å의 탐침을 1.0-2.0Å의 "일반" 원자 반지름과 함께 사용하는 경우). 현재 이 알고리즘을 개선하기 위해 작업 중입니다. 그동안 원자 반지름과 유사한 탐침 반지름을 사용하는 것이 권장되며, 이를 통해 피크 위치에서 0.1Å의 정확도를 기대할 수 있습니다.

**Stochastic Ray Tracing (확률적 광선 추적)**  
확률적 광선 추적 히스토그램은 빈 공간을 나타내는 히스토그램을 만드는 또 다른 방법을 제공합니다. 이 알고리즘은 셀 내의 접근 가능한 부피에 무작위 광선을 쏘고, 원자에 닿을 때까지 그 길이를 기록하여 해당 히스토그램을 생성합니다. 사용된 탐침 반지름에 대한 구문 및 제한 사항은 접근 가능한 부피 계산과 동일합니다:

./network -ray\_atom chan\_radius probe\_radius num\_samples outputfile.ray input\_structure.cssr

**Blocking Spheres (차단 구체)**  
차단 구체는 흡착의 몬테카를로 시뮬레이션에서 접근할 수 없는 영역을 제외하는 데 사용됩니다. Zeo++는 접근할 수 없는 영역을 식별하고 RASPA 형식의 해당 구체를 생성할 수 있습니다. 사용된 탐침 반지름에 대한 구문 및 제한 사항은 접근 가능한 부피 계산과 동일합니다:

./network -ha -block probe\_radius num\_samples input\_structure.cssr

**Distance Grids (거리 그리드)**  
각 그리드 포인트가 가장 가까운 원자의 표면(또는 "-nor" 플래그가 지정된 경우 가장 가까운 원자의 중심)까지의 거리를 할당받는 거리 그리드는 시각화에 자주 사용됩니다. Zeo++는 이러한 그리드를 Gaussian Cube 형식과 BOV 형식으로 저장할 수 있습니다. 첫 번째 형식은 VMD에서 쉽게 표시할 수 있으며, 두 번째 형식은 VisIT에 적합합니다. 구문은 각각 다음과 같습니다:

./network -gridG input\_structure.cssr

./network -gridBOV input\_structure.cssr

-grid는 Ang 단위를 사용하여 .cube 형식의 그리드 파일을 저장합니다. Bohr 단위로 .cube 파일을 생성하려면 -gridGBohr를 대신 사용하십시오. -gridBOV는 하나의 .bov 헤더 파일과 하나의 이진 데이터 파일을 저장합니다. 기본적으로 그리드 해상도는 0.2Å로 설정되어 있으며, 소스 코드(grid.cc)를 변경하여 조정할 수 있습니다.

**Structure Analysis (구조 분석)**  
구조 정보는 원자 연결 매트릭스에서 결정될 수 있습니다. Zeo++는 제공된 구조에서 존재하는 분자 프레임워크의 수를 식별하고 셀 수 있습니다. 또한 각 프레임워크의 차원성을 결정할 수 있습니다. 구문은 다음과 같습니다:

./network -strinfo input\_structure.cssr

결과는 .strinfo 파일에 저장됩니다. 제공된 MOF 구조에서 Open Metal Site의 수를 세기 위해서는 다음 구문을 사용할 수 있습니다:

./network -oms input\_structure.cssr

**구조 데이터 및 보로노이 네트워크 접근**

Zeo++는 입력 구조 파일(예: CSSR 파일)을 다른 파일 형식으로 변환할 수 있습니다. 원자의 카르테시안 좌표를 포함하는 두 가지 형식이 제공됩니다: 대부분의 분자 시각화 프로그램에서 사용되는 표준 .xyz 형식과 Zeo++의 .v1 형식입니다. 후자는 .xyz와 유사하지만, 단위 셀 벡터도 포함합니다. 예시인 EDI.cssr 파일에 대해 .xyz 및 .v1 파일을 생성하려면 다음 명령어를 사용하십시오:

./network -xyz EDI.cssr

./network -v1 EDI.cssr

주어진 구조에 대한 보로노이 네트워크는 Zeo++의 .nt2 파일 형식으로 저장할 수 있습니다. 이 파일은 네트워크의 모든 노드와 에지에 대한 정보를 포함합니다. 각 노드는 카르테시안 좌표에서의 위치, 가장 가까운 원자까지의 거리, 노드 연결성을 통해 특징지어집니다. 각 에지는 연결된 노드 쌍, 제약 거리, 그리고 길이로 설명됩니다. EDI.cssr 파일에 대한 .nt2 파일을 저장하려면 다음 명령어를 사용하십시오:

./network -r -nt2 EDI.cssr

-r 매개변수는 방사형 보로노이 분해를 요청하며, 즉 원자 반경이 사용됩니다. 결과 .nt2 파일에서 원자까지의 거리는 원자 표면까지의 거리를 나타냅니다. -nor을 지정하면 표준 보로노이 분해가 요청되며, 원자의 중심 대신 점 입자(반경 0)를 사용합니다. 이 경우 거리는 원자 중심까지의 거리가 정의됩니다.