



Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



Effiziente Modellierung molekularer Interaktionen

BENUTZERHANDBUCH

Kim Weißer, Asmaa Achoukhi, Mengdi Wang, Andreas Blank, Cindy Ching

Inhaltsverzeichnis

1Erste Schritte	2
1.1Betriebssystem.....	2
1.2Dateiformat.....	2
1.3Ablaufbedingungen.....	2
1.4Programminstallation	2
1.5Programmstart.....	2
2Energiefunktionen	4
2.1Polarisierungsenergien	6
2.2Dispersionsenergien	4
2.3Elektrostatische Energie	5
2.4H-Bruecken-Korrektur.....	5
2.5Berechnung der Lösungsmittelenergien / Lösungsmittelkorrektur	6

1 Erste Schritte

1.1 Betriebssystem

Da das Programm auf einem Linux-basiertem Betriebssystem implementiert wurde, sind die in dieser Anleitung genannten Kommandos Befehlsaufrufe im Linux-Terminal.

1.2 Dateiformat

Dafür müssen die Eingabemolekülkomplexe durch Dateien in folgendem emmi-Format repräsentiert werden:

1. Zeile: Anzahl der Atome
2. Zeile: Kommentarzeile
3. Zeile und folgende: Atomtyp x-Koordinate y-Koordinate z-Koordinate

1.3 Ablaufbedingungen

Bei dem Programm handelt es sich um ein Python-Skript, daher muss das System in der Lage sein python 2.7 auszuführen.

1.4 Programminstallation

Das Programm kann mit zugehörigen Dateien an einem beliebigen Ort abgelegt werden.

1.5 Programmstart

Der Aufruf erfolgt über die Kommandozeile im selben Verzeichnis in dem das Programm liegt mit:

```
$ ./mi.py [-h] [-nod] [-noe] [-nob] [-noh] [-nop] [-dse] [-ncm5] [mf]
```

positional Argumente:

mf	Pfad zur xyz-Moleküldatei, für welche die Energie berechnet werden soll.
-----------	--

optionale Argumente:

-h, --help	zeigt Hilfe an
-------------------	----------------

<code>-nod, --noDispersion</code>	Dispersionsenergie wird nicht berechnet
<code>-noe, --noElectrostatics</code>	Elektrostatische Energie wird nicht berechnet
<code>-nob, --noBorn</code>	Born Energie wird nicht berechnet
<code>-noh, --noHBondes</code>	H-Brücken-Energie wird nicht berechnet
<code>-nop, --noPolarisation</code>	Polarisationsenergie wird nicht berechnet
<code>-dse, --displaySingleEnergies</code>	Zeigt die einzelnen Energietermine an
<code>-ncm5, --noCM5Correction</code>	CM5-Korrektur wird ausgeschaltet

2 Energiefunktionen

2.1 Dispersionsenergien

Die Berechnung der Dispersionsenergien erfolgt über die Funktion:

```
calculateDispersionEnergy(  
    distanceMatrix,  
    natoms,  
    covalenceRadii,  
    elements,  
    atomTypes,  
    coordinationNumber)
```

Der das Programm wird mit dem Befehl `$./dispersion.py <option>` aufgerufen.

Obligatorische Kommandozeilenargumente sind:

<code><moleculeFile></code>	Paths to the xyz-molecule-file for which the Energy shall be calculated. The file must be in the following format: <AU AA> <number of atoms> <Comment line> Molecule Coordination
<code><covalentRadiiFile></code>	Paths to the covalent_radii_file The file must be in the following format: <Comment line> <covalent radii> each line starts with '.'

Optionale Argumente sind:

<code>-h, --help</code>	show this help message and exit
-------------------------	---------------------------------

`-sdc6, --showDispersionCoefficientc6aa` Disables printing of Dispersion coefficient c6aa.

Benötigt:

Atompositionen: `[[float]]`

Anzahl der Atome: `float`

Kovalente Radien der Atome: `[float]`

Atomtypen: `[char]`

`r2r4`: `[float]`

Referenz Dispersionskoeffiziente: `[[float]]`

2.2 Elektrostatische Energie

Der Programmaufruf zur Berechnung der elektrostatischen Energie erfolgt über:

```
$ ./electrostatic.py <moleculeFile> <option>
```

Als Input wird eine Moleküldatei im bereits unter Punkt 1.2. beschriebenen emmi-Format benötigt.

Argumente sind:

<code><moleculeFile></code>	Pfad zur Moleküldatei im emmi-Format.
-----------------------------------	---------------------------------------

Optionale Argumente sind:

<code>-h, --help</code>	Zeigt Hilfenachricht an.
-------------------------	--------------------------

<code>-ncm5, --noCM5Correction</code>	Schaltet CM5-Korrektur aus.
---------------------------------------	-----------------------------

<code>-spc, --showPartialCharge</code>	Zeigt Partialladungen an.
--	---------------------------

<code>-noe, --noElectrostaticEnergy</code>	Elektrostatische Energie soll nicht angezeigt werden.
--	---

2.3 H-Bruecken-Korrektur

Der Programmaufruf zur H-Brückenkorrektur erfolgt über:

```
$ ./hbond.py elements.txt rcov.dat input.xyz
```

Als Input wird eine Moleküldatei im bereits unter Punkt 1.2. beschriebenen emmi-Format benötigt. Zusätzlich benötigt man das Periodensystem elements.txt und die die kovalenten Radien rcov.dat

2.4 Berechnung der Lösungsmittelenergien / Lösungsmittelkorrektur

Aufruf:

```
$ ./born.py ./input.xyz ./rcov.dat ./elements.txt
```

Inputdatei: Moleküldatei im .xyz Format

Optionen: keine

zusätzlich verwendete Daten: supplement.py

2.5 Polarisierungsenergien

Aufruf: `$./polarisation.py [-h] [-xyz] mf`

Argumente sind:

<code>mf</code>	Pfad zu einem inp-Datei.
-----------------	--------------------------

Optionale Argumente sind:

<code>-h, --help</code>	Zeigt Hilfenachricht an.
-------------------------	--------------------------

<code>-xyz, --xyz</code>	Wenn die Option -xyz vorhanden ist, wird die Eingabedatei als xyz-Datei behandelt. Default ist .inp
--------------------------	---