

Момент инерции

Программа рассчитывает минимальный (I_x) и максимальный (I_z) моменты инерции молекулы используя координаты атомов из XYZ-файла.

Системные требования

Для нормальной работы программы необходимо, по меньшей мере, 2Gb оперативной памяти. Однако при расчёте сложных молекул (более 30 атомов) рекомендуемый объем оперативной памяти составляет 8 Gb.

Требования к программному обеспечению

Для выполнения программы необходим интерпретатор языка Perl версии не ниже 5.10 и командная оболочка для запуска программы. Программа может выполняться в командной оболочке Unix на операционной системе Linux, в которой интерпретатор Perl, как правило, уже присутствует с системе, и на операционной системе Microsoft Windows с использованием Windows Power Shell и установленного интерпретатора Perl, например, [Strawberry Perl](#).

Использование программы

Для использования программы запустите ее в командном интерпретаторе с указанием расположения XYZ-файла, например:

```
$ ./moments_of_inertia.pl filename.xyz
```

Программа создаст текстовый файл *filename.xyz.txt* с результатами расчета в директории, в которой расположен файл *filename.xyz*. Примеры исходных XYZ-файлов можно найти в директории *Examples*. Например, запуск программы с файлом *Pyridine.xyz* создаст файл *Pyridine.xyz.txt* с результатами расчета:

```
Calculation for data from file ./Pyridine.xyz
The calculation with step of the directing vector is 0.01
Coordinates of the center of gravity: (-0.18023; 0.36095; 0.29286)
Moment of inertia Ix is: 83.776 Da*(Å^2)
Moment of inertia Iz is: 170.861 Da*(Å^2)
```

Можно задавать параметры работы программы, используя следующие ключи запуска:

-v	Показать версию программы и завершить работу
-a[1-5]	Точность подсчета. Задается интервал перемещения направляющего вектора оси вращения в пространстве. Чем меньше интервал – тем точнее и дольше происходит расчет (см. принцип работы): -a1 – 0,1; -a2 – 0,05; -a3 – 0,01; -a4 – 0,005; -a5 – 0,001. По умолчанию используется ключ -a3
-o[1-5]	Число цифр после запятой, до которого будет округлено значение моментов инерции (в единицах Da*Å ²). По умолчанию используется ключ -o3

-d	Отображать координаты направляющих векторов осей с минимальным и максимальным моментами инерции
-----------	---

Например, результат расчета для молекулы пентана с использованием XYZ-файла из папки *Examples* с ключами по умолчанию будет выглядеть так:

```
Calculation for data from file ./Pentane.xyz
The calculation with step of the directing vector is 0.01
Coordinates of the center of gravity: (3.13712; 0.78884; -0.90687)
Moment of inertia Ix is: 29.987 Da*(Å^2)
Moment of inertia Iz is: 269.277 Da*(Å^2)
```

А при вызове программы с ключами

```
$ ./moments_of_inertia.pl -a2 -o4 -d ./Pentane.xyz
```

Будет выглядеть так:

```
Calculation for data from file ./Pentane.xyz
The calculation with step of the directing vector is 0.05
Coordinates of the center of gravity: (3.13712; 0.78884; -0.90687)
Moment of inertia Ix is: 29.9888 Da*(Å^2)
Moment of inertia Iz is: 269.2769 Da*(Å^2)
Coordinates of the directing vector a_x = {i, j, k} is: 0.55 0.25 -0.3
Coordinates of the directing vector a_z = {i, j, k} is: 0 -0.85 -0.7
```

Обратите внимание!

Обычно программы 3D-визуализации молекул сохраняют XYZ-файлы с координатной сеткой, в которой в качестве единицы длины взят 1 Å. При несоблюдении этого условия программа рассчитает моменты инерции некорректно по абсолютной величине, но в правильных соотношениях.

Контакты

С исправлениями, вопросами, замечаниями и предложениями обращаться по электронной почте:

Михаил Коверда m.kov@pm.me

Евгений Офицеров ofitser@mail.ru

Лицензия

Данная программа распространяется под лицензией GNU GPL v3.0.

Принцип работы

XYZ-файл представляет собой текстовый файл, в котором для каждого атома молекулы указаны его координаты в декартовой системе, например, XYZ-файл для пентана содержит следующую информацию:

17

C	0.88843	0.03444	0.00635
C	2.40855	0.05283	-0.01558
C	2.94163	0.96482	-1.12020
C	4.46987	0.98077	-1.13892
C	5.00405	1.88707	-2.23658
H	0.52876	-0.62374	0.80344

H	0.48677	-0.33185	-0.94384
H	0.48652	1.03669	0.18608
H	2.77834	-0.96831	-0.16472
H	2.77808	0.39277	0.95890
H	2.56526	1.98395	-0.96898
H	2.56572	0.62305	-2.09233
H	4.85117	-0.03520	-1.29421
H	4.85071	1.32591	-0.17064
H	4.66744	1.54992	-3.22215
H	6.09853	1.88355	-2.23189
H	4.66701	2.91854	-2.09234

Программа работает по следующему алгоритму:

- 1) Считываются данные из файла и производится замена символа элемента значением его атомной массы в дальтонах.
- 2) Рассчитываются координаты центра тяжести молекулы по формуле

$$X_c = \frac{\sum_i m_i x_i}{\sum_i m_i}$$

$$Y_c = \frac{\sum_i m_i y_i}{\sum_i m_i}$$

$$Z_c = \frac{\sum_i m_i z_i}{\sum_i m_i}$$

Где x_i, y_i, z_i – координаты i -го атома в молекуле, а m_i – его масса.

- 3) Задается прямая, проходящая через центр тяжести молекулы и имеющая произвольный направляющий вектор, например $\vec{a} = (0, -1, -1)$.
- 4) Координаты направляющего вектора итеративно изменяются с некоторым интервалом перемещения (задающимся ключом **-a**), так чтобы направление вектора соответствовало всем возможным направлениям оси вращения в пространстве, например, $\mathbf{a}_x = [0,1]$, $\mathbf{a}_y = [-1,1]$, $\mathbf{a}_z = [-1,1]$.
- 5) Для каждого положения оси в пространстве рассчитывается момент инерции относительно этой оси с учетом расстояния каждого атома до этой оси r_i и сохраняется в памяти:

$$I = \sum_i m_i r_i^2$$

- 6) После проведения расчета моментов инерции для всех положений оси программа выбирает наибольший и наименьший моменты инерции и возвращает их значения в единицах $\text{Da} \cdot \text{\AA}^2$, а также координаты направляющих векторов \vec{a} и \vec{b} для этих осей.
- 7) Полученные оси всегда перпендикулярны друг другу, в чем можно легко убедиться, подсчитав скалярное произведение направляющих векторов для этих осей.

$$(\vec{a}, \vec{b}) = \mathbf{a}_x \mathbf{b}_x + \mathbf{a}_y \mathbf{b}_y + \mathbf{a}_z \mathbf{b}_z = 0$$