

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 4 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.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 *Pentane.xyz* создаст файл *Pentane.txt* с результатами расчета:

```
This is Moment of inertia version 1.1
System date is Mon Feb 25 20:18:04 2019
Calculation for data from file /mnt/e/Pentane.xyz

The calculation with step of the directing vector is 0.05

-----
|Coordinates of the center of gravity          |
|-----|
|x              |y              |z              |
|-----|
|3.13712        |0.78884        |-0.90687       |
|-----|

-----
|Moments of inertia, Da*A^2                    |
|-----|
|Ix              |Iz              |
|-----|
|29.989          |269.277        |
|-----|
|-----|
```

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
-i	Вывести исходную информацию для расчёта

Например, результат расчета для молекулы пентана с использованием XYZ-файла из папки *Examples* с ключами **-a2 -o4 -d** будет выглядеть так:

```
$ ./moments_of_inertia.pl -a2 -o4 -d ./Pentane.xyz
$ cat ./Pentane.txt
This is Moment of inertia version 1.1
System date is Mon Feb 25 20:24:44 2019
Calculation for data from file /mnt/e/Pentane.xyz

The calculation with step of the directing vector is 0.05

-----
|Coordinates of the center of gravity          |
|-----|
|x          |y          |z          |
|-----|
|3.13712    |0.78884    |-0.90687   |
|-----|

-----
|Moments of inertia, Da*Å^2                    |
|-----|
|Ix          |Iz          |
|-----|
|29.9888     |269.2769    |
|-----|

-----
|Coordinates of the directing vectors          |
|-----|
|i          |j          |k          | |
|---|---|---|---|
|a_x        |0.55       |0.25       |-0.3       |
|-----|
|a_z        |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.

- Расчёт доступен для молекул, состоящих из следующих атомов: H, B, C, N, O, F, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Br, I.

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 $\vec{\mathbf{a}}$ и $\vec{\mathbf{b}}$ для этих осей.
- 7) Полученные оси всегда перпендикулярны друг другу, в чем можно легко убедиться, подсчитав скалярное произведение направляющих векторов для этих осей.

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