

Дополнительные материалы к статье

Геворкян В.Е., Парамонова Е.В., Авакян Л.А., Быстров В.С. «Математическая биология и биоинформатика». 2015. Т. 10. № 1. С. 131–153.

doi: [10.17537/2015.10.131](https://doi.org/10.17537/2015.10.131)

ПРИЛОЖЕНИЕ.

АЛГОРИТМ И ПРОГРАММА АВТОМАТИЗАЦИИ РАСЧЕТА ПЕТЛИ ГИСТЕРЕЗИСА «ПОЛЯРИЗАЦИЯ – ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ»

Краткое описание

Для автоматизированного проведения серий расчетов зависимостей поляризации от внешнего электрического поля при исследовании этой зависимости для различных сегнетоэлектриков (и, в частности, для исследуемых полимерных сегнетоэлектриков ПВДФ и П(ВДФ-ТрФЭ)) был разработан алгоритм и написана программа (скрипт) на языках Tcl и командном языке комплекса HyperChem HCL (Hyperchem Command Language).

Данный скрипт при каждом заданном значении электрического поля проводит сначала расчет с фиксированными позициями всех атомов (Single Point, SP-расчет), затем проводит оптимизацию геометрии (т.е. изменяются координаты всех атомов, определяется минимум полной энергии системы при изменении положения всех атомов и находится их оптимальное расположение) и выводит данные о полученных дипольном моменте, поляризации и энергии. На вход программы подается текстовый файл с параметрами алгоритма. Смысл и формат входных данных для скрипта продемонстрированы на примере.

Пример входного файла

```
5
semiempirical
PM3
30
0.5
test
105.90
1
0 0.005 10
0.05 -0.005 10
0 -0.001 75
-0.075 0.005 15
0 0.001 50
```

Здесь:

5 – число интервалов в расчете с различным шагом по полю, как по модулю, так и по знаку;

semiempirical – тип метода расчета;

PM3 – метод расчета;

30 – максимальное число циклов (maximum cycles);

0.5 – допускаемый градиент изменения полной энергии при каждом шаге, на котором надо остановить счет (RMS gradient);

test – имя входного файла без расширения (здесь задаем расчет для файла test.hin, у файла результатов название будет testPM3.dat);

105.90 – объём, заранее рассчитанный QSAR модулем HyperChem;

1 – направление прикладываемого электрического поля $x = 1$, $y = 2$, $z = 3$ (здесь поле

задается по x);

0 0.005 10 – стартовое значение поля, шаг, число точек в расчете для первого интервала;

0.05 -0.005 10 – стартовое значение поля, шаг, число точек для второго интервала;

0 -0.001 75 – стартовое значение поля, шаг, число точек для третьего интервала;

-0.075 0.005 15 – стартовое значение поля, шаг, число точек для четвертого интервала;

0 0.001 50 – стартовое значение поля, шаг, число точек для пятого интервала.

На каждом шаге после оптимизации сохраняется полученная молекулярная структура, при необходимости можно запускать следующую серию расчетов с любой из промежуточных геометрий.

Листинг скрипта

```
#Script for HyperChem for calculating hysteresis loop
#mail to: ekatp@yandex.ru

#open files
set fileid [ open "elfield_vol.in" "r" ]

#read number of electric field intervals
gets $fileid intnumber

#read method
gets $fileid method
gets $fileid methtype

set pconst 3.33556255
set enconvkoef 0.0015936

#set some general options
hcExec "query-response-has-tag no"
hcExec "file-needs-saved no"
hcExec "quantum-print-level 0"
hcExec "warning-type log"

#read method parameters
gets $fileid maxcycles
gets $fileid rmsgrad

#set optimization options
hcExec "optim-max-cycles $maxcycles"
hcExec "optim-convergence $rmsgrad"
hcExec "optim-algorithm polakribiere"

# set options specific to two methods

if {$method == "semiempirical"} then {
hcExec "calculation-method semiempirical"
}

#set scf options
hcExec "scf-convergence 0.00001"
hcExec "accelerate-scf-convergence Yes"
hcExec "max-iterations 50"
hcExec "excited-state No"
hcExec "configuration-interaction NoCI"

#get molecule name
gets $fileid molname

#turn into hinfile name
set hinfile $molname
append hinfile ".hin"

#bring the file into HyperChem
```

```

hcExec "open-file $hinfile"

#set name of output file
set outfile $molname
append outfile $methtype
append outfile ".dat"
set fileid2 [ open "$outfile" "w" ]

set outline "E(MV/cm)"
append outline " "
append outline "Field(a.u.)"
append outline " "
append outline "FieldHC(a.u.)"
append outline " "
append outline "EnergySP(kcal/mol)"
append outline " "
append outline "EnergySP(a.u.)"
append outline " "
append outline "Energy(kcal/mol)"
append outline " "
append outline "Energy(a.u.)"
append outline " "
append outline "DipoleX(SP)"
append outline " "
append outline "DipoleY(SP)"
append outline " "
append outline "DipoleZ(SP)"
append outline " "
append outline "TotalDipole"
append outline " "
append outline "DipoleX"
append outline " "
append outline "DipoleY"
append outline " "
append outline "DipoleZ"
append outline " "
append outline "P(C/m2)"
append outline " "
append outline "rms-gradient"
puts $fileid2 $outline

#get qsar volume from in file
gets $fileid volume

set k 1
#get electric field direction
gets $fileid filedir

#head of loop
for {set j 0} {$j < $intnumber} {incr j} {

#get line with cycles parameters
gets $fileid inputline

set inielfield [lindex $inputline 0]
set step [lindex $inputline 1]
set stepnumber [lindex $inputline 2]

#head of loop
for {set i 0} {$i < $stepnumber} {incr i} {

hcExec "semi-empirical-method $methtype"

set field [expr $inielfield+$i*$step]
set fieldinv [expr -1*$field]
set fieldmvcm [expr 1000*5.14*$field]

```

```

hcExec "field-strength $fieldinv"
hcExec "field-direction $fileddir"
hcExec "use-electric-field yes"

#do calculations
hcExec "do-single-point"

set energysp [hcQuery "total-energy"]
set energyspau [expr $enconvkoef*$energysp]
set dipolecomponentssp [hcQuery "dipole-moment-components"]

hcExec "do-optimization"
hcExec "do-single-point"

#find results
set energy [hcQuery "total-energy"]
set dipole [hcQuery "dipole-moment"]
set dipolecomponents [hcQuery "dipole-moment-components"]
set rmsgradient [hcQuery "rms-gradient"]

set energyau [expr $enconvkoef*$energy]

set fileddir1 [expr $fileddir-1]

#extracting dipole component to find polarisation
#set dipmi [lindex $dipolecomponents $fileddir1]
set dipolecomponents_lentgh [string length $dipolecomponents]
set comma1 [string first "," $dipolecomponents]
set dipm(1) [string range $dipolecomponents 0 [expr $comma1 - 1] ]
set dipm(1) [string trimleft $dipm(1)]

set comma2 [string last "," $dipolecomponents]
set dipm(2) [string range $dipolecomponents [expr $comma1 + 1] [expr $comma2 - 1]]
set dipm(2) [string trimleft $dipm(2)]

set dipm(3) [string range $dipolecomponents [expr $comma2 + 1]
$dipolecomponents_lentgh]
set dipm(3) [string trimleft $dipm(3)]

set polar [expr $pconst*$dipm($fileddir)/$volume]

set outline $fieldmvcn
append outline " "
append outline $field
append outline " "
append outline $fieldinv
append outline " "
append outline $energysp
append outline " "
append outline $energyspau
append outline " "
append outline $energy
append outline " "
append outline $energyau
append outline " "
append outline $dipolecomponentssp
append outline " "
append outline $dipole
append outline " "
append outline $dipolecomponents
append outline " "
append outline $polar
append outline " "
append outline $rmsgradient
#write to file
puts $fileid2 $outline

```

```
#save hin files
#set k [expr $i + $j]

set outfile $molname
append outfile "_ "
append outfile $k
append outfile "_field_"
append outfile $fieldinv
hcExec "write-file $outfile.hin"
#set fileid2 [ open "$outfile" "w" ]
set k [expr $k+1]

# end of for $i
}
# end of for $j
}

#close files
close $fileid
close $fileid2
```