



Universidad de La Habana, Cuba

MANUAL DEL USUARIO DE TC HAVANA GRANADA

Programa: GRANADA

DISTRIBUCIÓN ALEATORIA DE MOLÉCULAS ALREDEDOR DE UN SISTEMA POLIATÓMICO CENTRAL

Granada es un programa ejecutable de MS-DOS que está diseñado para leer archivos de coordenadas cartesianas o internas que contienen datos atómicos de moléculas con el fin de generar celdas dónde las moléculas medioambientales están rodeando o están en las cavidades del sistema central de forma completamente aleatoria. Los archivos que produce pueden ser lo mismo de coordenadas cartesianas que internas MOPAC. **Granada** *no* utiliza ningún potencial que pueda alterar la distribución perfectamente aleatoria de las moléculas.

Escrito por Luis A. Montero, Facultad de Química, Universidad de La Habana 10400, Cuba en la Universidad de Granada, Grupo de Modelización y Diseño Molecular, Granada 18071, España, en junio, 1996. Esta entrega es una versión revisada de junio, 2000.

LA ENTRADA:

Un archivo nombrado *input* (sin extensión) debe estar presente en el directorio predefinido y contiene los parámetros generales para la corrida. Los formatos de la entrada son amplios y pueden entrarse como datos numéricos separados por comas.

Primera línea:

$nlim, di\ men, nconf, nfsolv, (fracm(i), i=1, nfsolv)$

$nlim$ = es el número de moléculas medioambientales o del solvente deseadas. Si se entra como un valor negativo, se permitirá a las mismas ocupar el espacio aleatorio completo, incluyendo cavidades dentro de la molécula del soluto. Si es positivo, las moléculas del solventes rodearán externamente un elipsoide con las dimensiones de la molécula del soluto. En todos los casos, el origen de las coordenadas cartesianas del soluto se fija en el centro (medio) de sus coordenadas absolutas.

$di\ men$ = la mitad de la dimensión (en Ångstroms) sobre todos los ejes cartesianos de un cubo virtual dónde las moléculas medioambientales se pondrán aleatoriamente. El volumen del cubo será $(2*di\ men)^3$. Si se entra como un valor negativo, el soluto será considerado como un sólido

colocado a d_{men} Ångstroms debajo del plano XY escogido y una segunda línea de datos se leerá del archivo *input* con las opciones adicionales.

nconf = es el número de configuraciones o geometrías aleatorias a ser generado. Significa que los archivos de salida serán *nconf* sucesiones de celdas con las distribuciones aleatorias diferentes de las moléculas medioambientales (el implícito es 1). Si se entra como un valor negativo, todos los archivos de la entrada son de coordenadas internas MOPAC. Si es positivo o sin signo, son archivos de coordenadas cartesianas .CAR, que es el implícito (ver definición y formatos al final)

nfsolv = es el número de moléculas medioambientales diferentes a ser tenido en cuenta si no se quiere que las moléculas medioambientales sean el agua pura (el máximo es 5, y el implícito 0 para el agua)

fracm(i) = es la fracción molar de la molécula medioambiental *i*. Pueden escribirse hasta *nfsolv* valores de *fracm(i)*. Estas fracciones molares sólo se refieren a las moléculas medioambientales, NO AL SOLUTO O MOLÉCULA CENTRAL.

SI EL d_{men} SE ENTRA COMO UN VALOR NEGATIVO (esta opción es experimental):

Segunda línea:

ncavidd, *ncatal*

ncavidd = 1 Las moléculas medioambientales se ponen encima del sistema central (o “soluto”) que está situado $abs(d_{\text{men}})$ Ångstroms debajo del plano XY en la dirección de Z (el valor por defecto).

ncavidd = 2 El sistema central (o “soluto”) se reproduce con una imagen especular de si mismo, a d_{men} Ångstroms encima del plano XY en la dirección de Z. En este caso las moléculas medioambientales se disponen aleatoriamente entre la molécula central debajo y su imagen encima del plano XY.

ncatal = 0 Todos los átomos de salida se preparan para la optimización de MOPAC (el valor por defecto).

ncatal = 1 Las únicas moléculas a ser optimizadas por MOPAC son solo aquéllas del “solvente” o medio ambientales distribuídas aleatoriamente.

Línea final:

Un texto de opciones MOPAC limitado a 80 columnas que será usado en el archivo de salida para la entrada del programa de cálculo semiempírico.

LA SALIDA:

La salida de Granada consiste en 5 archivos de textos cuyo nombre común es “SOLVATED” y con las extensiones .MOP cuando se trata de la entrada que puede usarse para las optimizaciones con el programa MOPAC en coordenadas internas, .XYZ cuando se trata de la entrada que puede usarse para las optimizaciones con el programa MOPAC en coordenadas cartesianas, .LOG cuando se trata de los detalles de la formación de cada celda, .CAR cuando se trata del equivalente a .XYZ pero en el formato de archivos .CAR descrito al final, y .INP cuando es el de los detalles implícitos generales a la generación de todas las celdas.

UN EJEMPLO DEL ARCHIVO *input*:

```
8, -6.5, 5, 2, 0.25, 0.75
2, 1
pm3 preci se geo-ok ef
```

En este caso:

$nlim=8$, $dimen=-6.5$, $nconf=5$, $nfsolv=2$, $fracm(1)=0.25$,
 $fracm(2)=0.75$, $ncavidd=2$, y $ncatal=1$,

La línea de comandos en el archivo MOPAC será: pm3 preci se geo-ok ef

LA LÍNEA DE COMANDOS DE GRANADA:

El programa GRANADA se opera desde el “command prompt” o ventana MS-DOS de Windows. Una línea de comandos típica es:

```
granada <mol ec. central >[.CAR] [<s1>[.CAR] [<s2>[.CAR]]...]
```

Donde mol ec. central es el nombre del archivo con las coordenadas del soluto o molécula central, cuya extensión implícita es .CAR si nconf es positivo y .MOP si es negativo, y S1 son los nombres de los archivos con las coordenadas de los solventes, siguiendo el mismo formato de acuerdo con nconf. Los nombres de los solventes S1, S2, etc. deben aparecer en el orden de sus fracciones molares en el archivo *input*. Si se desea que el agua pura sea la molécula medioambiental, los nombres de archivos S1 no son necesarios.

Así, si nconf se entra como un valor negativo:

```
granada <mol ec. central >[.MOP] [<s1>[.MOP] [<s2>[.MOP]]...]
```

ARCHIVOS .CAR

Los archivos .CAR tienen el siguiente formato:

Línea 1:

cols. 2-4: N #Número de átomos en la entrada.

Líneas 2 y 3:

80 cols.: #Comentarios

Línea 4 hasta la 3+N:

Para cada átomo I :

cols 2-11: X(I) #coordenada X en Ångstroms

cols 12-21: Y(I) #coordenada Y en Ångstroms

cols 22-31: Z(I) #coordenada Z en Ångstroms

cols 32-35: NAT(I) #número atómico