

Методика автоматического разбиения сложных молекулярных систем на жёсткие эффективные фрагменты

Алексей Одинокоев,

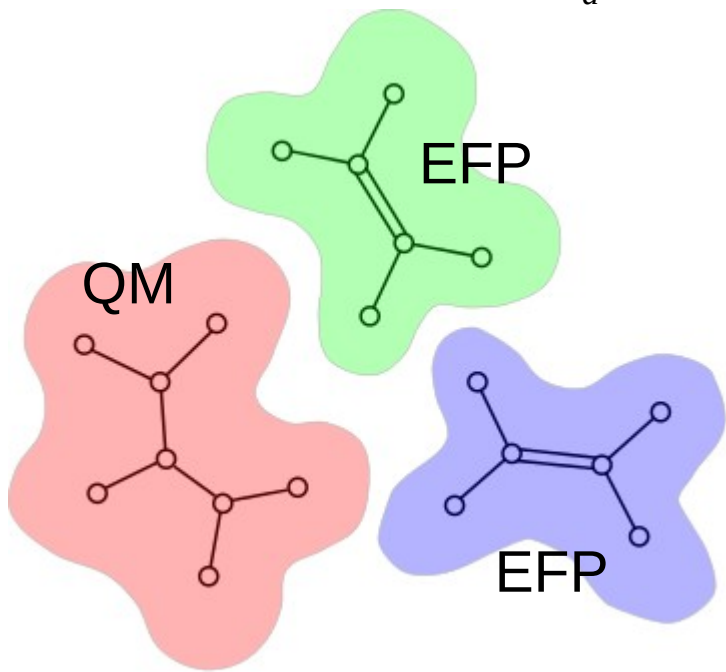
Центр Фотохимии РАН

5-я школа-конференция Атомистическое Моделирование Функциональных Материалов,
ASFM 2016 Fall, 29-30 ноября 2016 г.

Взаимодействие в рамках приближения эффективных фрагментных потенциалов

$$E_{EFP-EFP} = E_{elec} + E_{pol} + E_{disp} + E_{xr} + E_{ct}$$

$$V_k^{elec}(x) = q_k T(r_{kx}) - \sum_a^{x,y,z} \mu_k^a T^a(r_{kx}) + \frac{1}{3} \sum_{a,b}^{x,y,z} \Theta_k^{a,b} T^{a,b}(r_{kx}) - \frac{1}{15} \sum_{a,b,c}^{x,y,z} \Omega_k^{a,b,c} T^{a,b,c}(r_{kx})$$



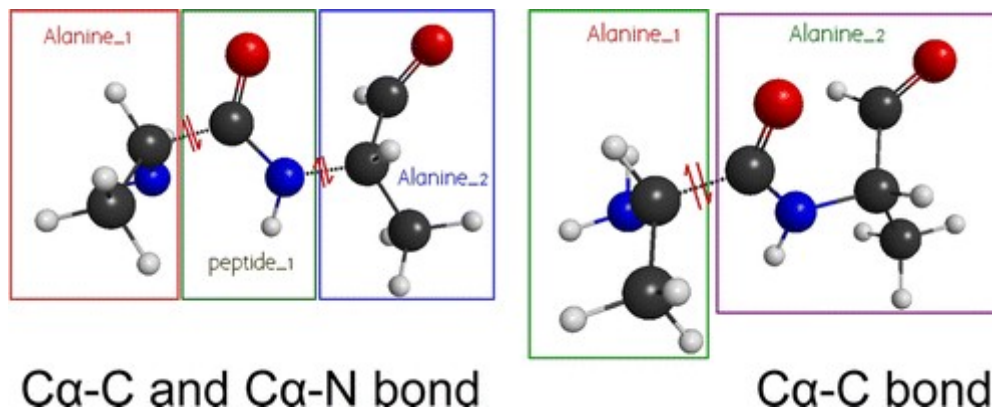
$$E_{pol} = -\frac{1}{2} \sum_i \mu_i F(x_i)$$

μ_i – индуцированный дипольный момент

$F(x_i)$ – поле в точке i

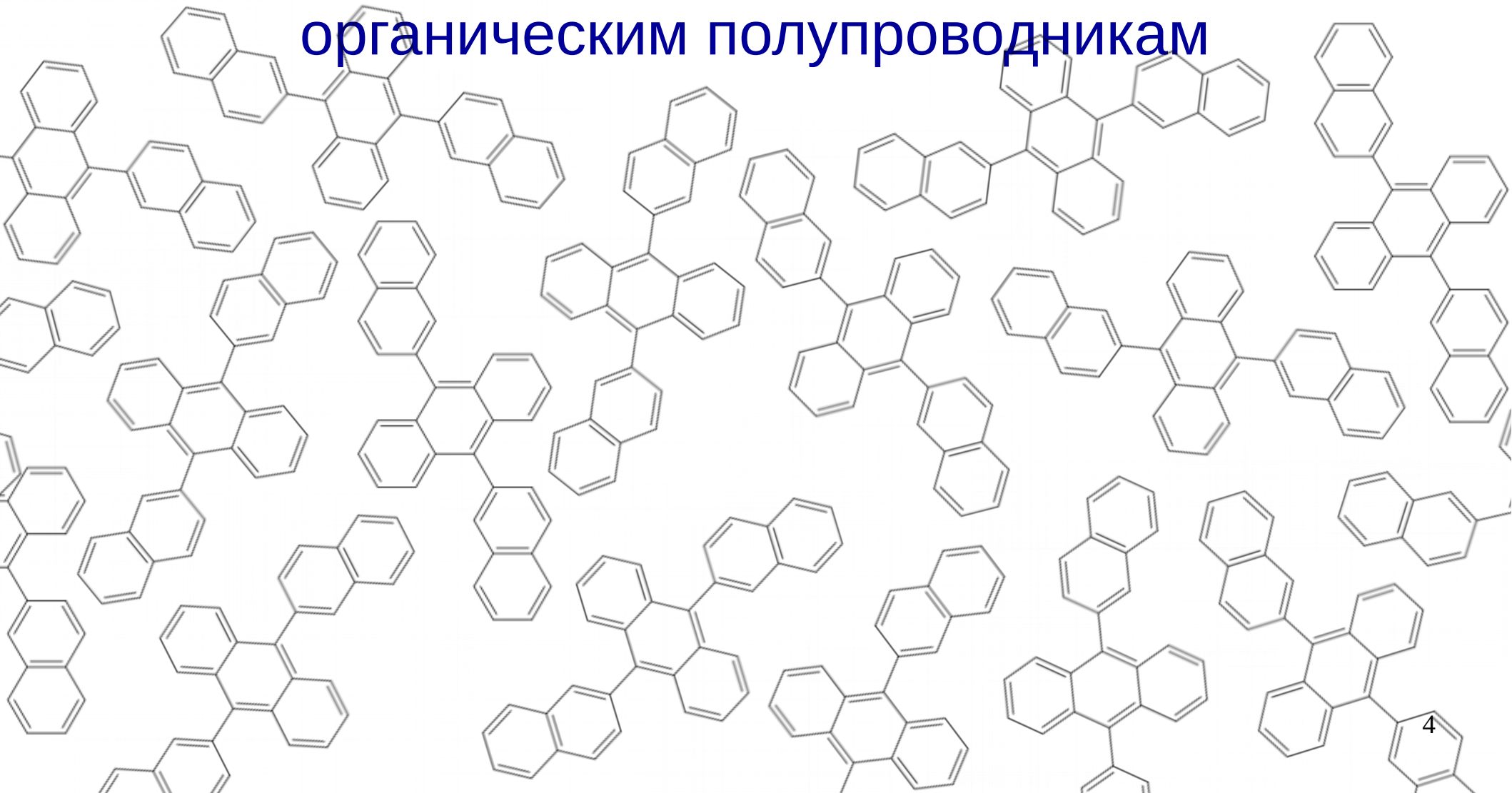
$$F = [1 - \exp(-\alpha r^2)(1 + \alpha r^2)] F_0$$

Разбиение на эффективные фрагменты вдоль ковалентных связей



Pradeep Kumar Gurunathan, Atanu Acharya, Debashree Ghosh, Dmytro Kosenkov, Ilya Kaliman, Yihan Shao, Anna I. Krylov, and Lyudmila V. Slipchenko, "Extension of the Effective Fragment Potential Method to Macromolecules", *J. Phys. Chem. B*, 2016, **120**, 6562–6574.

Методика эффективных фрагментных потенциалов применительно к типичным органическим полупроводникам



Методика эффективных фрагментных потенциалов применительно к типичным органическим полупроводникам



Методика эффективных фрагментных потенциалов применительно к типичным органическим полупроводникам

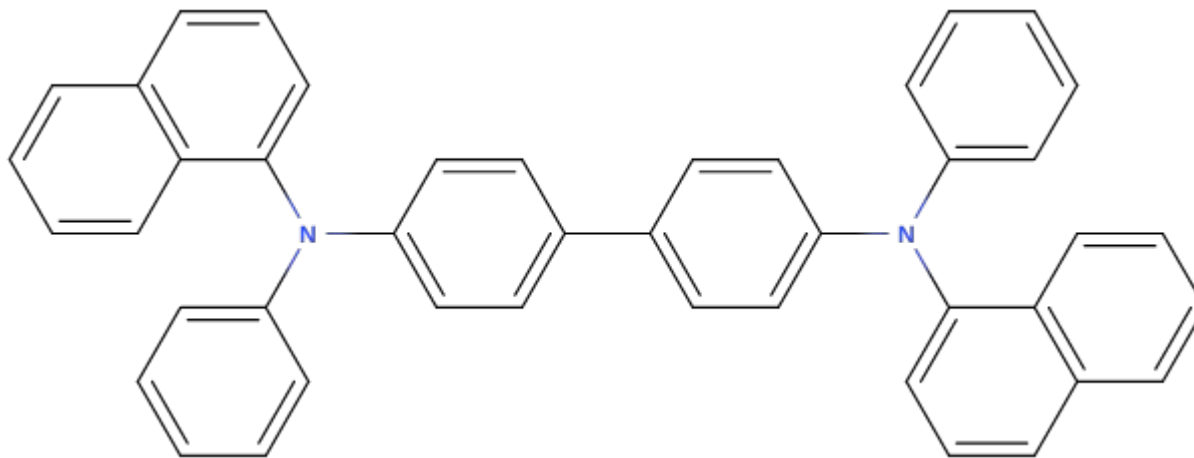
Основные задачи:

- Автоматическое распознавание фрагментов, из которых состоит система.
- Создание новых координат путём замены “гибких” входных координат фрагментов на “жёсткие” координаты из базы данных.
- Создание входного файла с описанием системы в рамках модели EFP.

Вспомогательные задачи:

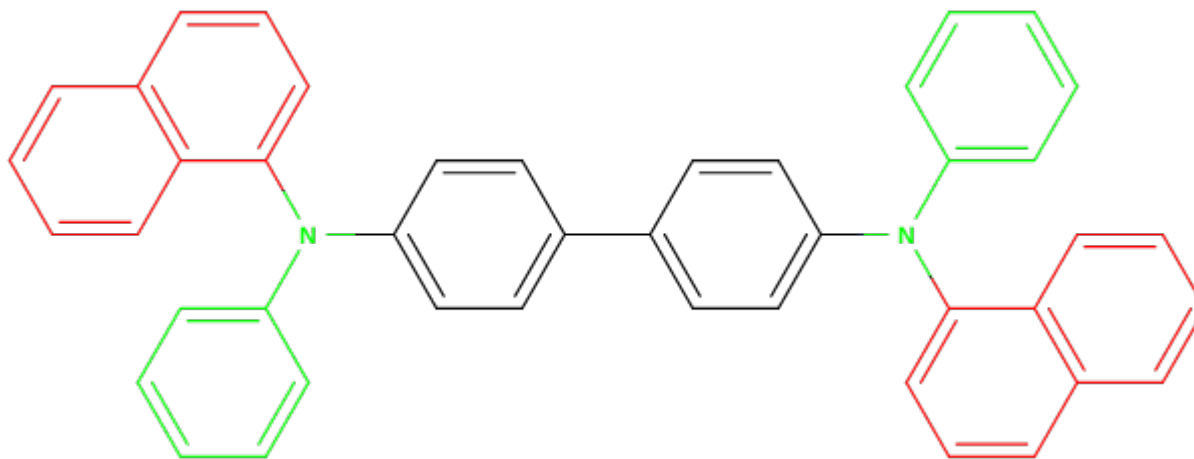
- Предварительная обработка входных координат.
- Создание базы данных фрагментов

Разбиение структуры молекулы на набор непересекающихся фрагментов



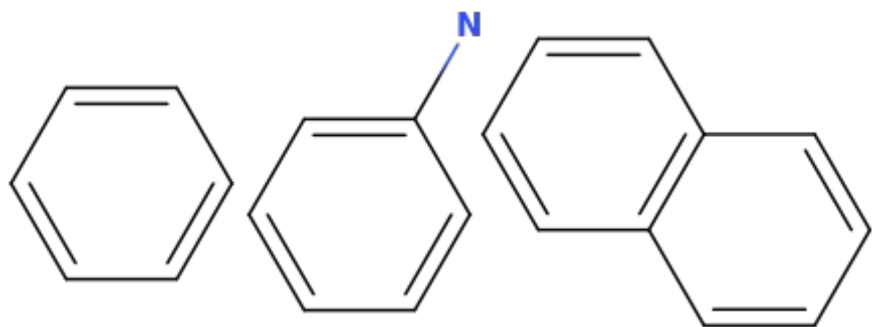
N,N'-Di(1-naphthyl)-N,N'-diphenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (α -NPD)

Разбиение структуры молекулы на набор непересекающихся фрагментов

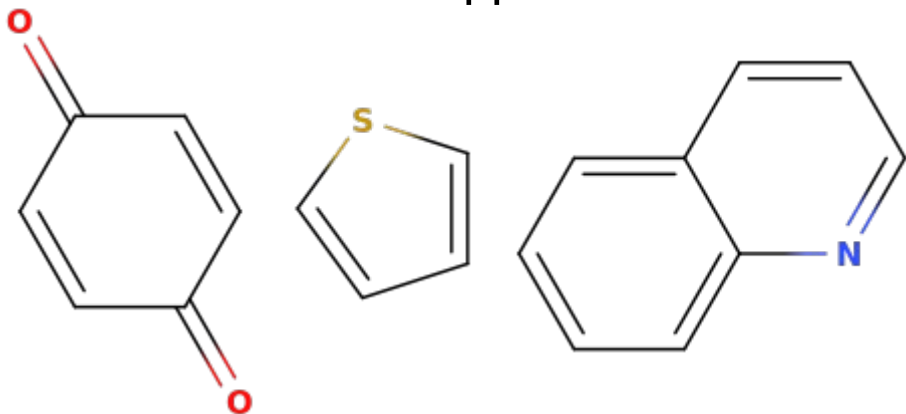


N,N'-Di(1-naphthyl)-N,N'-diphenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (α -NPD)

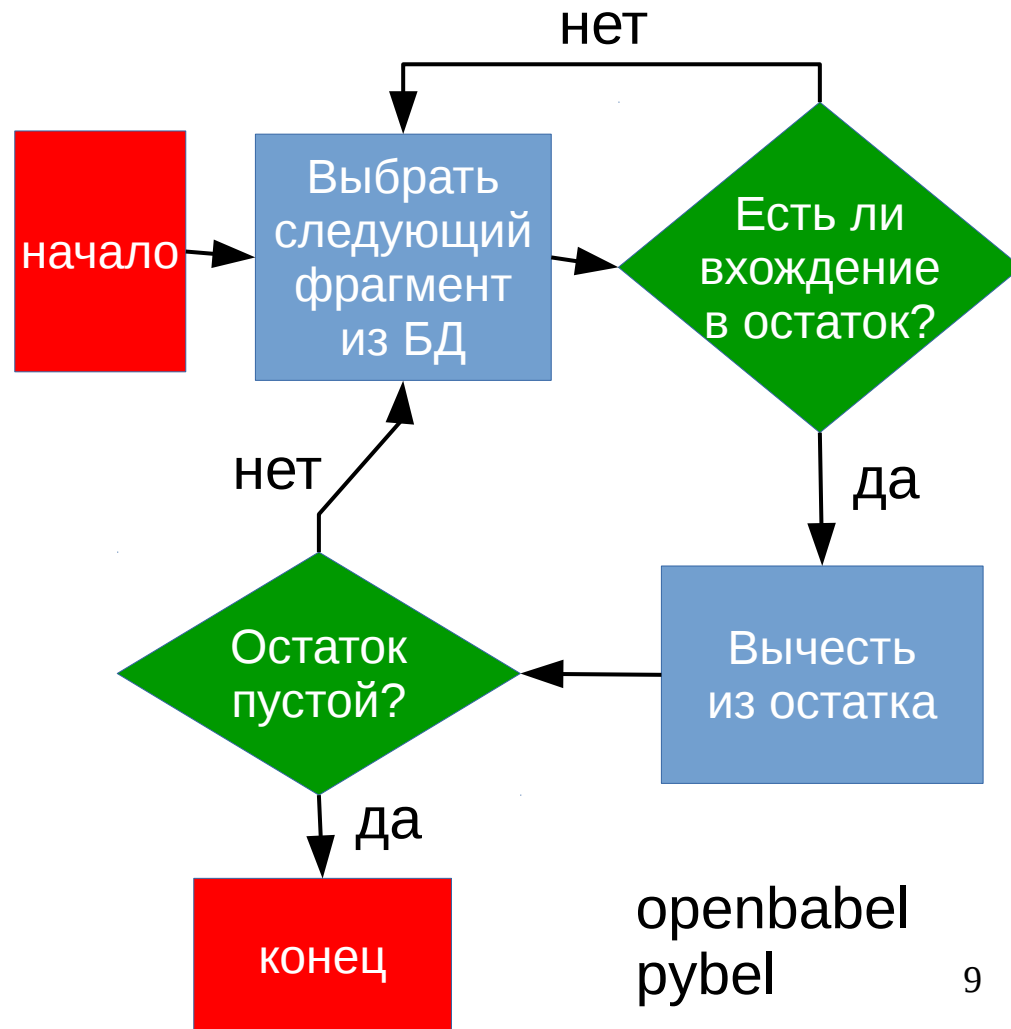
Автоматическая процедура поиска



Необходимые фрагменты
в базе данных

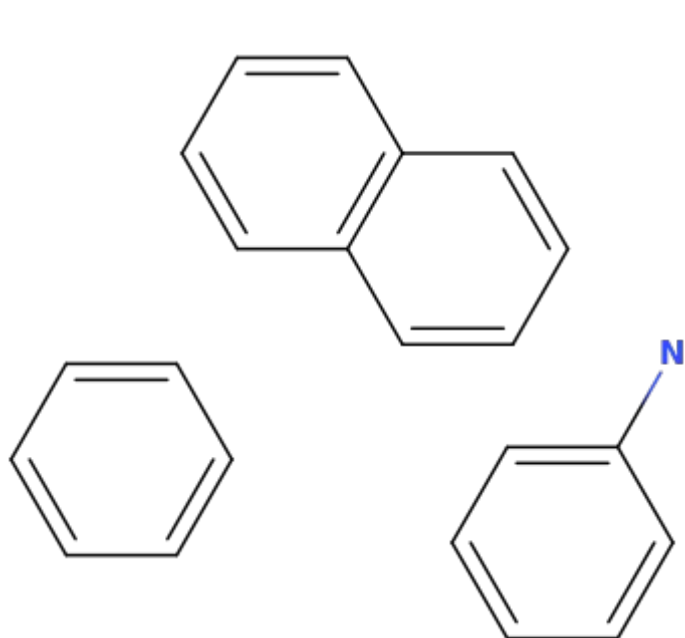


Другие фрагменты

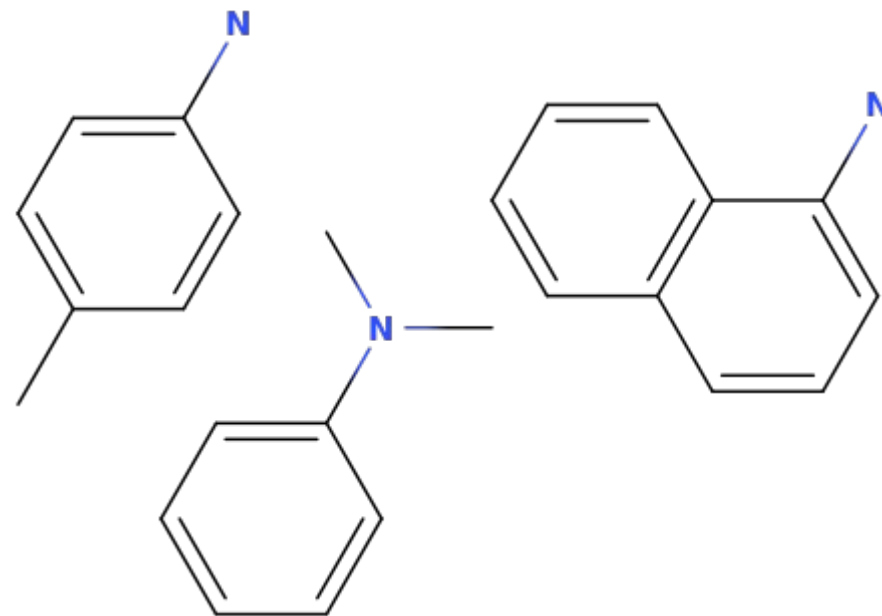


openbabel
pybel

Автоматическая процедура поиска

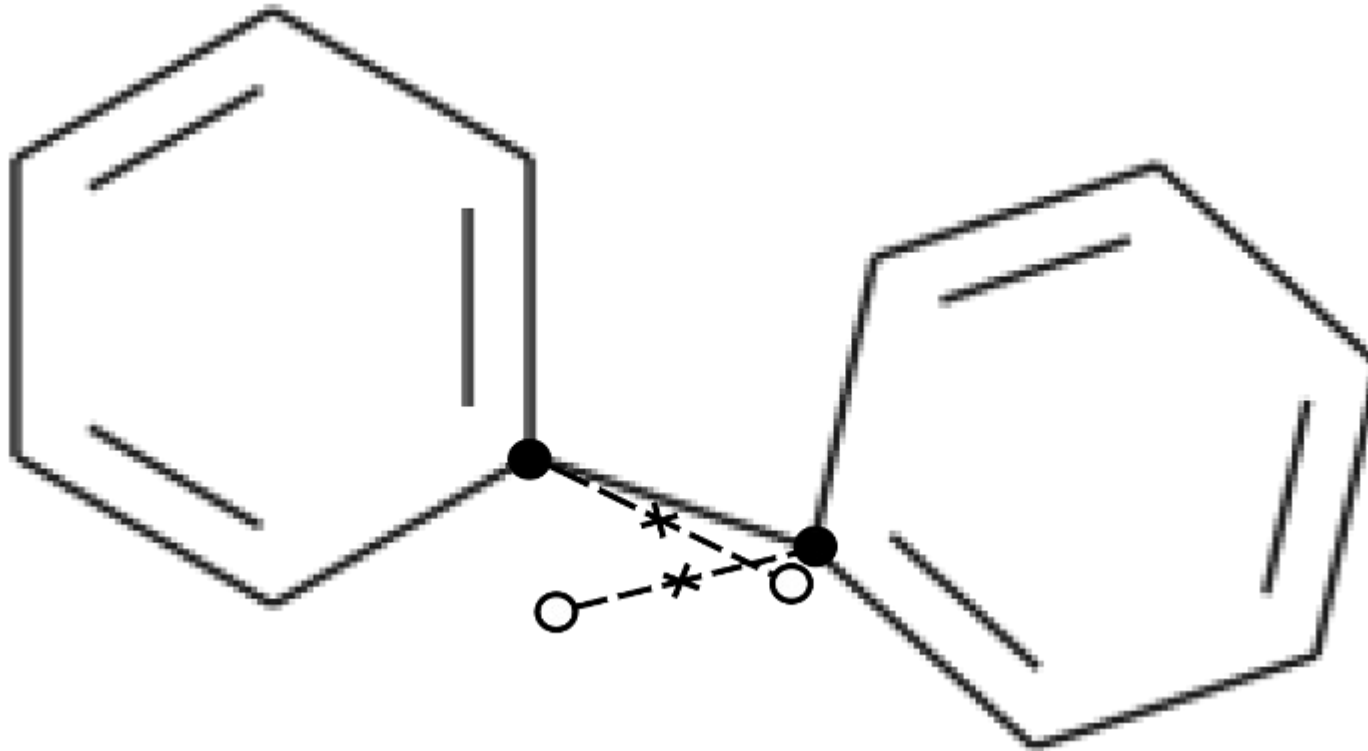


Необходимые фрагменты

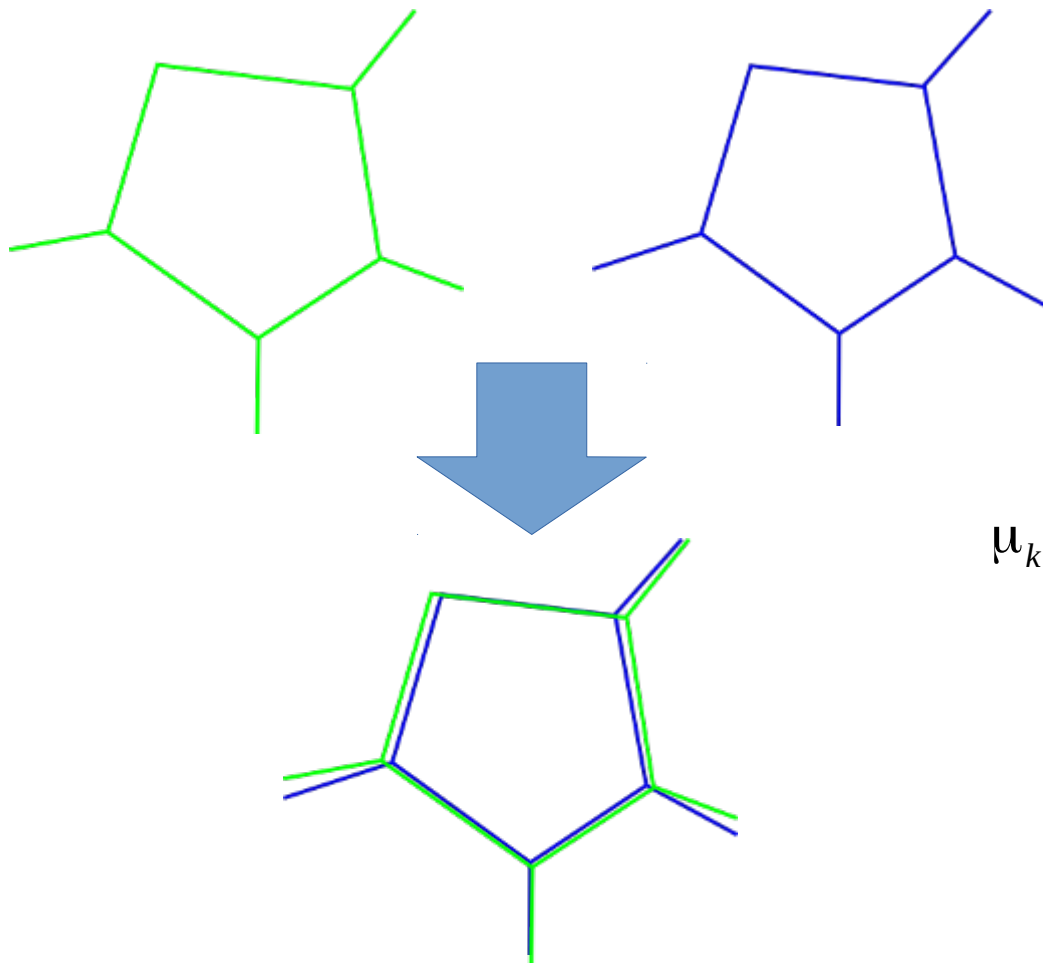


Необходимые варианты
СВЯЗНОСТИ

Принцип сшивки фрагментов вдоль ковалентной связи



Наложение геометрии из базы данных с помощью алгоритма Кабша



x_n, y_n - два набора координат атомов

$$R_{ij} = \sum_n w_n y_{ni} x_{nj}$$

$$S_{ij} = \sum_n w_n x_{ni} x_{nj}$$

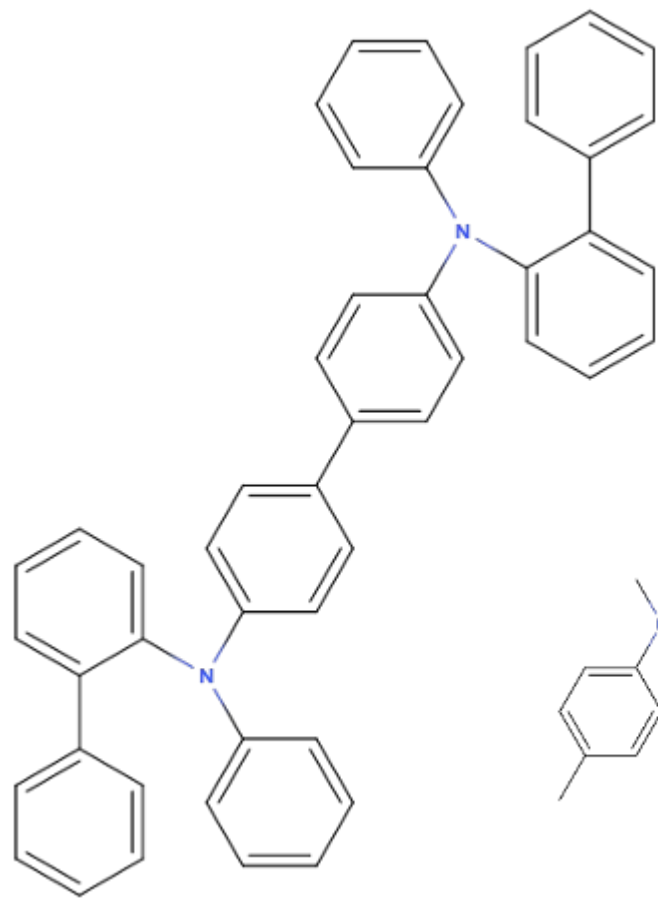
$$(S+L)(S+L) = \tilde{R} R$$

μ_k, \mathbf{a}_k - собственные числа и вектора матрицы $\tilde{R} R$

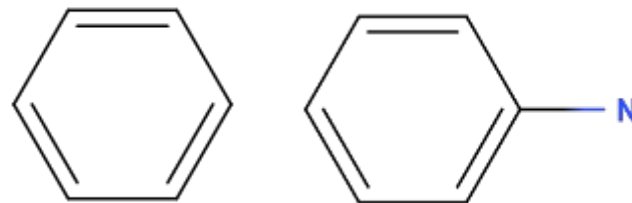
$$\mathbf{b}_k = R \mathbf{a}_k / \sqrt{\mu_k} \quad U_{ij} = \sum_k b_{ki} a_{kj}$$

$$\sum_n w_n (U x_n - y_n)^2 \rightarrow \min$$

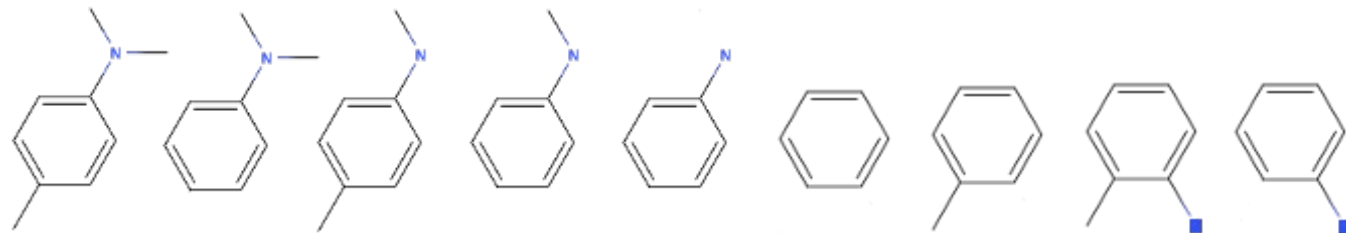
Расчёт ширины распределения энергии дырки в аморфном oVPD



Необходимые фрагменты:

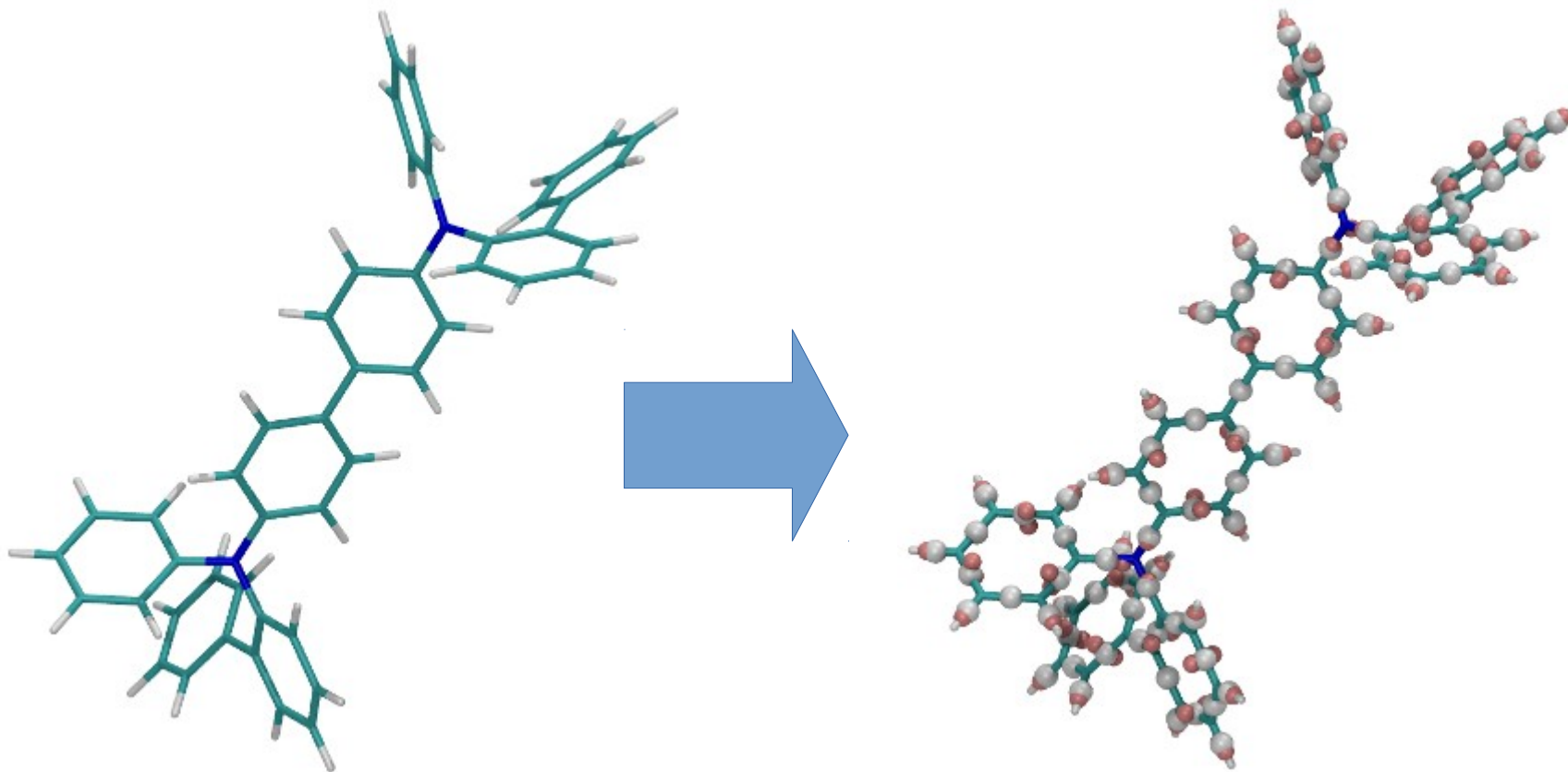


Варианты связности:

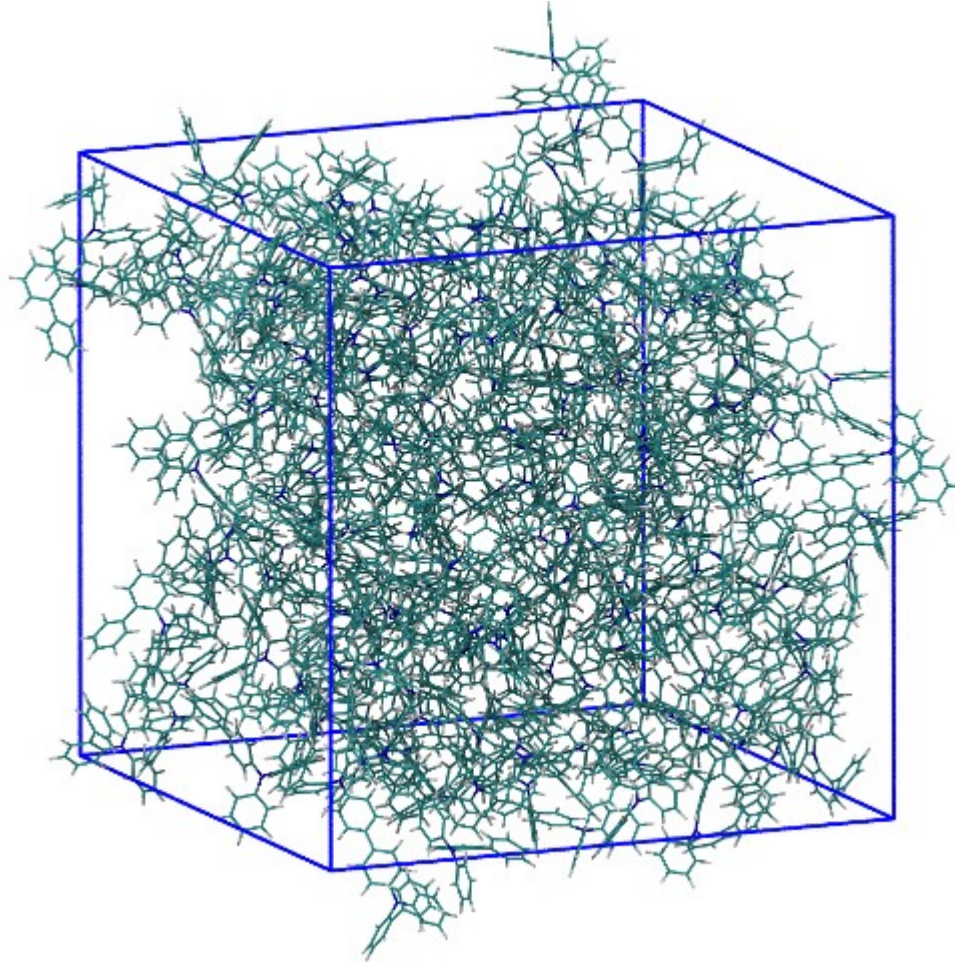


N,N'-di(biphenyl-2-yl)-N,N'-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine

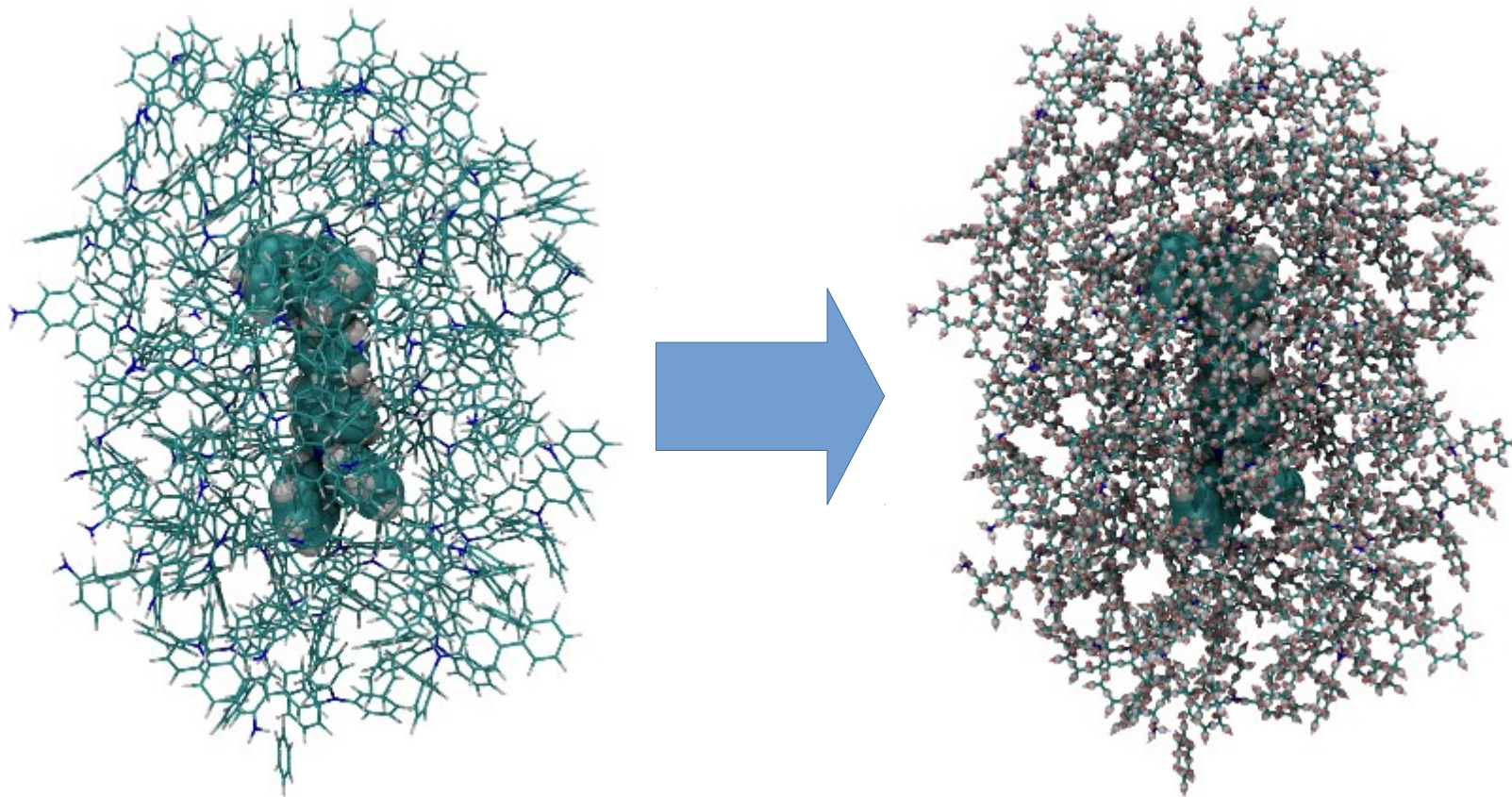
Представление молекулы oVRD в виде комбинации эффективных фрагментов



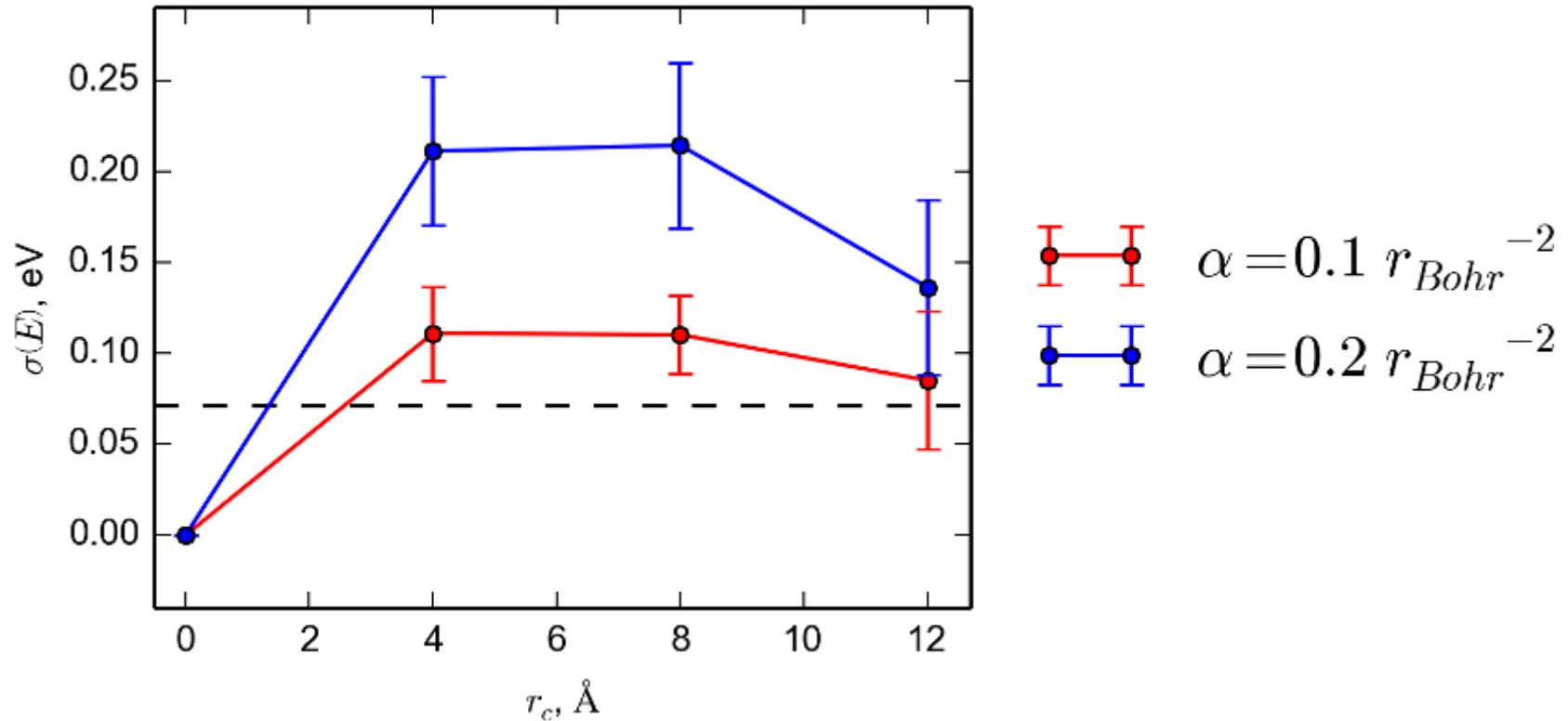
Моделирование морфологии материала с помощью метода молекулярной динамики



Представление среды в приближении эффективных фрагментных потенциалов



Ширина распределения энергии дырки при разных значениях параметра экранирования



Организация базы данных фрагментов

Пример файла с
метаинформацией:

```
$frag  
Phen  
c1ccccc1  
1 Toluene Aniline  
2 oXylene mXylene pXylene oAminTol  
3 135triMethBen 135triAminBen  
$endfrag
```

```
$frag  
Anil  
Nc1ccccc1  
2 NNdiMethAnil  
3 pNNdiMethAminTol  
$endfrag
```

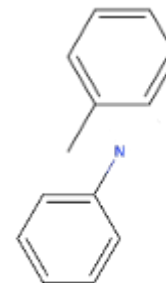


Phen



Toluene.efp

Aniline.efp

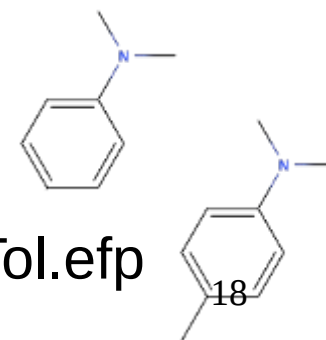


Anil



NndiMethAnil.efp

PNNdiMethAminTol.efp



Реализация алгоритма

Код на python доступен на github:

<https://github.com/ale-odinokov/pyEFP>

- **Convert2EFP.py** – представление системы в виде комбинации эффективных фрагментов, хранящихся в базе данных.
- **gencluster.py** – создание кластера, состоящего из “ядра” и оболочки заданной толщины
- **CreateNewFragment.py** – создание входных файлов для КХ расчёта нового фрагмента, добавление результатов в базу данных

Особенности алгоритма и область применения

- Относительно небольшое число фрагментов позволяет описать большое количество органических полупроводников
- Быстрый расчёт для больших систем
- Легко обрабатывать МД траектории и другие ансамбли
- Если есть фрагменты в базе данных, нет необходимости в GAMESS US

- Использует приближение жёстких фрагментов, не подходит для “гибких” систем
- Применение оправдано только в случае очень больших систем, больших ансамблей, либо в отсутствие КХ части.
- Зависимость результата от параметра экранирования