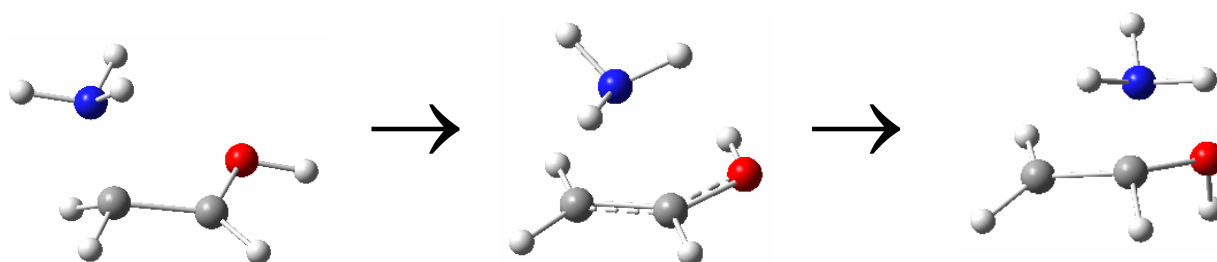


PRACTICO 6
Armando los archivos de entrada para las reacciones que les fueron asignadas.

Objetivo: Armar un archivo de entrada (**fu5**) para correr un cálculo en el marco de la TST. Estudiar el ejemplo de la migración 1,2 en la etanolamina.

Migración 1,2 en la etanolamina:



A continuación mostramos la estructura del archivo fu5 (**.dat**) para realizar el cálculo y determinar la constante de velocidad más sencilla posible (no requiere de archivos adicionales al fu5). Como podrán observar se ingresa en el archivo de entrada la información mínima requerida para llevar a cabo un cálculo en el marco de la TST sin considerar efecto túnel. Para el cálculo de las funciones de partición se usan a su vez las aproximaciones más simples (ej. oscilador armónico para las vibraciones). La constante de velocidad se calculará de forma directa e inversa para temperaturas que van desde 98 K a 1500 K. Examine cuidadosamente las opciones del archivo **.dat** que le mostramos como ejemplo teniendo en cuenta que la omisión de alguna opción implica usar las que vienen por defecto en el programa Polyrate.

Archivo fu5:

```
*GENERAL
TITLE
(NH3+)CH2CHOH ->CH2CHOH(NH3+) TST
END

ATOMS
1 O
2 C
3 C
4 N
5 H
6 H
7 H
8 H
9 H
10 H
11 H
END
```

*ENERGETICS

*REACT1

STATUS 6

GEOM

1 -2.78294563E+00 -1.05542063E+00 -3.55651249E-01
2 -1.52507313E+00 9.86397714E-01 5.26086314E-01
3 9.88547309E-01 1.32435691E+00 -5.60243804E-01
4 2.81759770E+00 -9.07389211E-01 2.68770973E-01
5 -4.48227133E+00 -1.15170794E+00 3.36628807E-01
6 -2.30377188E+00 2.14603472E+00 2.02225722E+00
7 1.90196176E+00 3.06466092E+00 5.49012703E-02
8 1.00508192E+00 1.18728069E+00 -2.62511450E+00
9 3.11325926E+00 -8.93855663E-01 2.18630917E+00
10 1.98199388E+00 -2.59977666E+00 -1.85794374E-01
11 4.54328246E+00 -8.22074311E-01 -6.20429479E-01
END

SPECIES NONLINRP

NOPROJECT

ENERGY -2.100910678500419E+02

FREQUNIT WAVEN

FREQ

3742.3986 3495.5443 3484.1523 3380.326
3250.3291 3193.0929 3092.6335 1696.0688
1683.5091 1523.6349 1492.0559 1476.9963
1378.1198 1343.874 1279.385 1252.4343
1096.5689 1042.1813 947.7293 838.8008
653.9335 502.2871 451.2707 363.501
279.0301 219.4246 97.1548
END

*PROD1

STATUS 6

GEOM

1 -2.34525075E-02 2.49965725E+00 -2.48574057E-01
2 2.66696937E-01 7.06721091E-02 7.31911052E-01
3 2.46006876E+00 -1.36722639E+00 -2.45137115E-01
4 -2.25953178E+00 -1.12783660E+00 -1.92321354E-01
5 1.47167349E+00 3.50861686E+00 1.04338402E-01
6 1.32546838E-01 -3.46308304E-03 2.80125171E+00
7 3.47292472E+00 -2.68324519E+00 9.54591812E-01
8 3.10206806E+00 -1.03491175E+00 -2.16555698E+00
9 -3.75458458E+00 -5.93602447E-02 4.46631818E-01
10 -2.30579441E+00 -1.09098275E+00 -2.13517648E+00
11 -2.47508579E+00 -2.95972997E+00 4.08118040E-01
END

SPECIES NONLINRP

NOPROJECT

ENERGY -2.100758620486574E+02

FREQUNIT WAVEN

FREQ

3743.5188 3503.7241 3471.1906 3378.0369
3301.7461 3183.9485 3068.4525 1687.7636
1663.2575 1510.6478 1475.0864 1422.3097

1392.3725 1269.1825 1197.422 1183.5201
994.484 970.2181 933.9993 748.8236
610.7031 495.2344 427.2547 362.0344
226.7843 208.383 174.5031
END

*START

STATUS 6
GEOM

1 -2.44989619E+00 -1.72051008E+00 -2.05430213E-01
2 -1.19593440E+00 1.24157696E-01 8.52371891E-01
3 -7.04169183E-01 2.47471713E+00 -2.29196051E-01
4 3.39719374E+00 -6.36117985E-01 -1.44049066E-01
5 -2.99817066E+00 -1.33960281E+00 -1.92952090E+00
6 -7.22189855E-01 -2.82343204E-01 2.80657501E+00
7 2.36129896E-01 3.91775776E+00 8.78494783E-01
8 -1.26175471E+00 2.92341808E+00 -2.15498601E+00
9 4.50802642E+00 -1.06998607E-01 1.33807484E+00
10 4.13091371E+00 7.08377520E-02 -1.77812815E+00
11 3.32648007E+00 -2.55941140E+00 -2.47779461E-01
END

SPECIES NONLINTS

NOPROJECT

ENERGY -2.100704350160021E+02
FREQUIT WAVEN
FREQ

3653.9319 3604.2089 3598.1752 3456.2689
3301.058 3248.4759 3187.0765 1681.9106
1676.9843 1606.2543 1487.7534 1415.2756
1316.0095 1165.3199 1070.4554 1023.3356
988.2317 866.0285 661.746 549.8381
496.0096 437.2783 425.0521 244.2868
185.1614 73.651 -105.1165
END

EIGENVECTOR

0.09 0 0 0 0 0.03 0.05 0.02 0.03 -0.15 -0.19 -0.07 -0.13 0.08 0.05 0.02 0.06 -0.03 0.11 0 0.03 -0.12 -0.01 -0.01 -0.02 -0.04 0.01 0 0
-0.18 0 0 0 0 0 -0.16 0.02 0.03 -0.05 0.37 -0.05 0.13 -0.01 -0.03 0.05 0.01 -0.03 0.02 0.03 -0.05 -0.01 0 -0.02 -0.07 0.01 0 0 0
0.04 0 0 0 0 0 -0.02 -0.01 0.12 0.01 0.05 -0.17 -0.06 0.01 0 -0.15 -0.06 0.05 0 -0.04 -0.03 -0.03 0.06 0 0.01 0.07 -0.05 0 0 0 0
0.05 0 0 0 0 0.01 0.04 -0.15 0.01 -0.14 0.05 0.12 0.01 -0.06 -0.07 -0.03 0.02 0.02 0.1 0 0.2 0 0.01 0 0 -0.03 0 0 0
-0.22 0 0 0 0 0 0.13 0.11 -0.01 0.16 -0.10 -0.08 0.02 0.03 -0.05 -0.11 -0.08 0.03 0.08 0.01 0.11 0 0.01 0 0 0.05 0 0 0
0.09 0 0 0 0 0.01 0.01 -0.24 -0.05 0.05 0.05 0.01 -0.08 0.03 0.11 0.01 -0.06 -0.09 -0.01 0.01 0.01 -0.01 0 0 0 0.01 0.06 0 0 0
-0.05 0 0 0 0 -0.04 0.07 -0.09 -0.06 0.12 -0.02 0.04 0.05 -0.05 -0.03 0.05 0.01 0 -0.01 -0.04 0 -0.06 0 0 0 0 0 0 -0.06
0.25 0 0 0 0 0 -0.01 -0.08 -0.06 0.02 0.06 -0.01 0.04 0.05 -0.07 0 0.06 0.11 0.07 0 -0.03 0 -0.03 0 0 0 0 0 0 -0.01
0.12 0 0 0 0 0.01 0.11 -0.03 -0.05 0.02 0.01 0.01 -0.02 0 0.02 0.07 0.05 0.01 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0.02
-0.08 0 0 0 0 0 -0.13 0.16 0.01 0.1 0.16 -0.02 -0.07 -0.07 -0.01 0 -0.04 0.01 -0.01 0.03 -0.06 -0.01 -0.03 -0.03 0 0 0.03 0.06 0.02
0.13 0 0 0 0 0.01 0.13 -0.06 -0.01 -0.1 -0.21 -0.04 -0.01 -0.06 0.01 0.02 -0.04 0.04 -0.04 -0.02 0.07 0.04 -0.03 -0.01 0 0 0 -0.03 0.04
-0.22 0 0 0 0 0 0 -0.03 0.01 0 0.08 -0.02 0.07 0.01 0.07 0.01 -0.05 0.04 0.04 0 -0.03 -0.02 -0.03 0.04 0 0 0.01 -0.04 0.07 0
0.06 0 0 0 0 0.01 0.06 0.31 0.15 -0.33 -0.01 0.09 0.14 -0.1 0.51 0.22 0.32 -0.5 -0.58 -0.07 -0.16 0.34 -0.01 0.02 0 -0.01 0 0 0 0
0.01 0 0 0 0 0.01 -0.45 0.26 0.12 -0.39 0.21 0.42 -0.11 -0.07 0.13 0.04 -0.32 0.13 0.43 -0.54 -0.31 0.35 0.03 -0.02 -0.07 0.02 0 0 0
0.01 0 0 0 0 0 -0.04 -0.02 0.11 0.01 0.07 -0.14 -0.08 0.01 0.01 -0.16 -0.07 0.08 -0.02 -0.08 0.02 0.03 -0.01 0.01 -0.93 0.33 -0.05 -0
0.09 0 0 0 0 0.02 0.02 -0.05 -0.02 0.01 -0.16 -0.04 -0.3 0.54 0.05 0.12 -0.25 0.57 -0.48 -0.11 -0.12 0.1 0.03 0.16 0.42 -0.05 0 0 0
-0.37 0 0 0 0 0 0.46 -0.05 0.01 -0.03 0.29 -0.24 0.05 -0.02 -0.09 -0.11 0.32 -0.36 0.28 -0.13 -0.02 -0.01 -0.03 -0.01 0.3 0.78 -0.08
0.13 0 0 0 0 0.04 0.02 0.43 0.13 -0.28 0.43 0.11 -0.23 0.12 0.03 -0.22 0.12 -0.03 0.55 0.33 -0.4 0 0.01 0.11 0.28 -0.03 0 0 0
-0.07 0 0 0 0 0 -0.05 0.05 0.05 -0.04 -0.3 -0.09 0.06 0.22 -0.13 0.08 -0.68 -0.13 0 -0.23 -0.29 -0.04 -0.42 0 -0.01 0 0.04 0.39 0 0 0
0.19 0 0 0 0 0 -0.01 0.15 -0.14 0.08 0.2 0.01 0.06 0 -0.07 0.14 -0.46 -0.2 -0.09 -0.14 -0.19 -0.01 -0.31 0 0 0 -0.06 -0.56 0 0 0
0.16 0 0 0 0 0.04 0.07 -0.15 -0.07 -0.11 0 -0.1 0.02 0.11 0.01 -0.06 -0.11 -0.01 0.01 0 -0.02 -0.01 0 0.01 -0.08 -0.72 0 0 0 -0.01
-0.1 0 0 0 0 0 -0.05 0.1 -0.23 0.3 0.19 -0.08 0.04 0.08 -0.02 -0.12 0.11 -0.08 -0.06 -0.03 -0.06 0 -0.11 0 0 0 0 -0.01 0 0 0.92
0.56 0 0 0 0 0 -0.49 0.25 -0.45 -0.37 0.14 -0.04 0.26 0.11 -0.47 0.39 -0.49 -0.36 -0.11 -0.14 -0.02 -0.28 0.01 0 0 0 0 0 0 0.06
0.06 0 0 0 0 0 -0.01 0.01 -0.17 0.78 0.06 -0.11 -0.03 0.12 0.09 -0.29 0.22 -0.29 -0.2 -0.06 -0.07 0 -0.16 0 0 0 0.01 0 0 -0.37
-0.09 0 0 0 0 0.03 -0.14 0.17 -0.03 0.26 -0.11 0.34 0.11 0.39 -0.02 -0.03 0.13 -0.07 0.04 -0.23 0.42 0.13 -0.36 0.24 0 -0.01 0 0.24 -
0.06 0 0 0 0 0.06 0 -0.07 0.01 -0.15 -0.07 -0.3 -0.04 -0.31 0.08 0.05 -0.16 0.11 -0.04 0.13 -0.24 -0.07 0.13 0.06 0 -0.01 0 0.45 -0.4
-0.12 0 0 0 0 0 -0.58 -0.06 0.01 0.01 -0.1 0.08 0.28 -0.16 0.1 -0.15 -0.05 0.1 -0.07 -0.05 -0.06 0.19 0.1 0.01 -0.68 0 -0.01 0 0.13 -0.
-0.17 0 0 0 0 0 0.47 -0.17 0.04 0.01 0.03 0.25 0.04 -0.3 -0.16 -0.14 -0.02 0.01 -0.03 -0.07 -0.04 0.12 0.07 0.27 -0.02 0.01 0 0 -0.58 -
0.21 0 0 0 0 0.08 0.09 0.04 -0.04 0.18 -0.53 0.15 0.44 0.47 0.15 -0.03 0.1 -0.04 0.12 0.21 -0.4 -0.19 0.29 -0.37 -0.01 0 0 -0.05 -0.0
-0.21 0 0 0 0 0.31 -0.04 -0.25 0 -0.09 0.24 0.12 -0.31 -0.1 -0.18 -0.04 0.06 -0.05 -0.06 -0.1 0.24 0.1 0.59 0.01 0 0 0.31 0.34 -0.0

```

-0.02 0 0 0 0 0 -0.5 -0.22 0.43 0.03 0.21 -0.06 -0.14 0.37 0.15 0.26 0.04 -0.08 0.04 0.1 -0.17 0.29 0.06 0.56 0.27 0 0 0 -0.07 0.06 -0.
0.04 0 0 0 0 0 0 -0.13 0.31 -0.11 -0.02 -0.2 -0.16 0.44 -0.32 0.14 -0.3 -0.09 0.23 -0.13 -0.05 0.21 -0.39 -0.16 0.09 0.5 0 0 0 -0.02 0.02
-0.21 0 0 0 0 0 0 0.24 -0.03 -0.07 0.01 -0.02 0.11 -0.01 0.01 -0.02 0.03 0.01 -0.05 0.04 0.03 0.01 -0.06 -0.02 -0.12 -0.02 0.01 -0.01 0 -
END

*RATE

BOTHK
SIGMAF 1
SIGMAR 1
TST
NOCVT
NOEDGEOK
PRPART rpt

TEMP
98.
100.
150.
200.
300.
600.
800.
1000.
1500.
END

GSPEC
smax 1.0
smin -1.0
END

END

```

Archivo jc:

Para realizar un cálculo de cinética cuando no tenemos superficie analítica disponible (lo que se denomina cálculo de dinámica directa) se utiliza un ejecutable denominado **poly_dumpot.exe** (se encuentra en el directorio exe de la estructura del Polyrate) que no es otra cosa que una superficie fantasma que le dice al programa que debe buscar la información de los puntos sobre la superficie de energía potencial que son necesarios dentro del archivo **fu5** y archivos adicionales (fu29, fu31, fu40) si estos estuvieran disponibles y correctamente mencionados en el archivo fu5 como veremos más adelante en el transcurso del práctico.

```

#!/bin/csh -f
#
#
if ($#argv != 0) then
  set wrkdir = $argv[1]
else
  set wrkdir = `pwd`
endif
#
cd $wrkdir
#
# Set the names of the testrun and the executable
#
set name = EAL
set polydir = `cat ~/.poly_path8.0`
set exedir = $polydir/exe
set exe = $exedir/poly_dumpot.exe

```

Nombre del archivo **.dat**
y **.jc**

Mención al ejecutable
poly_dumpot.exe

```

set dscript = $polydir/script
#
# Check if the executable is available
#
date >> $name.time
#
# Compilando el ejecutable
#
$dscript/exe_chk.jc 2 dumpot 11 >>& $name.time
#
# Delete the fu# files left previously if any
#
rm poly.fu* >& /dev/null
#
# Copy the data files to POLYRATE filenames.
#
cp $name.dat poly.fu5
#
# Write syssem message to .time file
#
(time $exe) >>& $name.time
echo " " >> $name.time
#
# Copy the POLYRATE output files to appropriate filenames
#
rm poly.fu5 poly.fu31
mv poly.fu6 $name.fu6
mv poly.fu15 $name.fu15
rm esp.fu61
#
# End of script

```

Compilación del ejecutable poly_dumpot.exe usando el archivo de dimensiones param2.inc para un sistema que contiene 11 átomos. Ver explicación a continuación.

Compilación del ejecutable poly_dumpot.exe con el archivo param2.inc (la definición de los parámetros que mostramos a continuación se encuentra detallada en la página 29 del manual):

Las dimensiones por defecto que trae el programa en sus cuatro archivos **param*.inc** vienen especificadas en la página 30 del manual del Polyrate.

Como puede verse para el caso del estudio de la migración 1,2 de la etanolamina se ha redimensionado el parámetro **NATOMS** para un sistema de 20 átomos a pesar de que el sistema tiene un máximo de 11 átomos. Tenga en cuenta que la modificación se hizo sobre el archivo **param2.inc** ya que fue el elegido para compilar el ejecutable poly_dumpot.exe en el archivo de script (.jc).

```

PARAMETER (NSDIM= 701)                                0601YC98
C
PARAMETER (NSDM = 701)
C
PARAMETER (NSDML = 701)
C
PARAMETER (NATOMS = 20)
C
PARAMETER (MAXINT=3*NATOMS+6, MAXCAR=3*NATOMS)        0626YC97
C
PARAMETER (NPOTPT = 1)
C
PARAMETER (MAXPS = 5)
C
PARAMETER (MAXWKB = 50)

```

C	PARAMETER (NMSPEC = 20)	
C	PARAMETER (INMM = 10)	1001JC97

Quando tenga prontos los archivos **.dat** y **.jc** y redimensionado para las características de sus reacciones el **param*.inc** que decidan usar, pueden largar el cálculo como lo hacen habitualmente. Las directivas que están en el archivo de script (.jc) se encargarán de compilar la superficie fantasma (poly_dumpot.exe) y correr el cálculo.