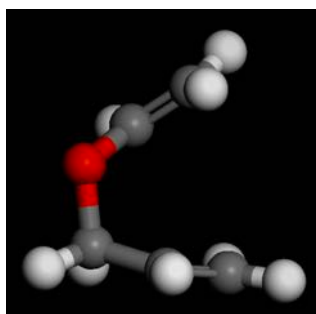


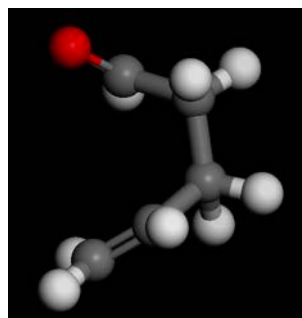
LASP 使用入门3 – 过渡态搜索初级

已知势能面的两个结构寻找反应动力学路径

参见 LASP
examples
NN-5

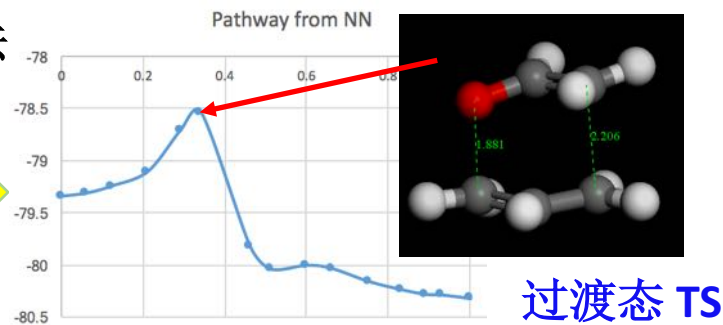


初态 IS



终态 FS

两点行走法
(DESW)



lasp.in

关键词

Explore_type **SSW** 选择SSW模块

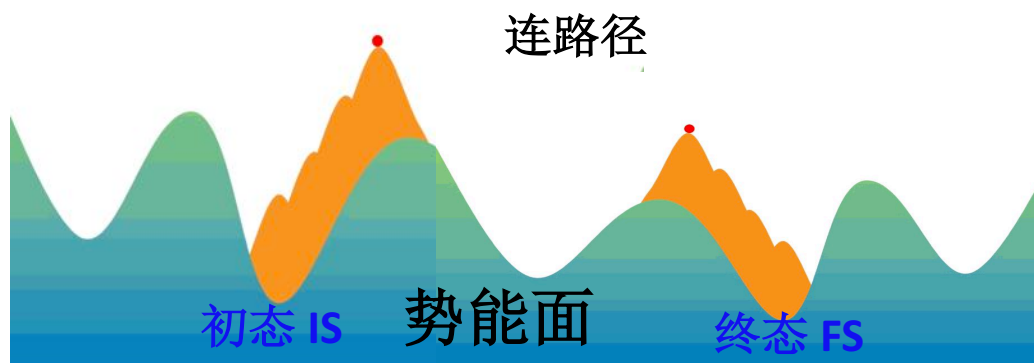
选择SSW
任务类型

Run_type **2** 晶胞大小固定 适用无周期性分子，团簇
固定晶胞的表面反应

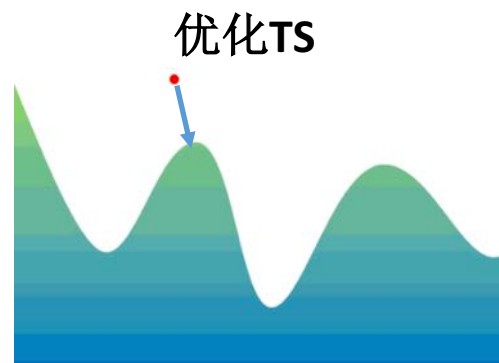
Run_type **12** 晶胞大小可动 适用周期性固体相变（晶体）

LASP 使用入门3 - 过渡态搜索初级

两点行走法 (DESW) 工作原理



分别从初态和终态添加偏置势，
并局部优化，直到两个结构相遇



从行走轨迹中取最高点，
优化到过渡态

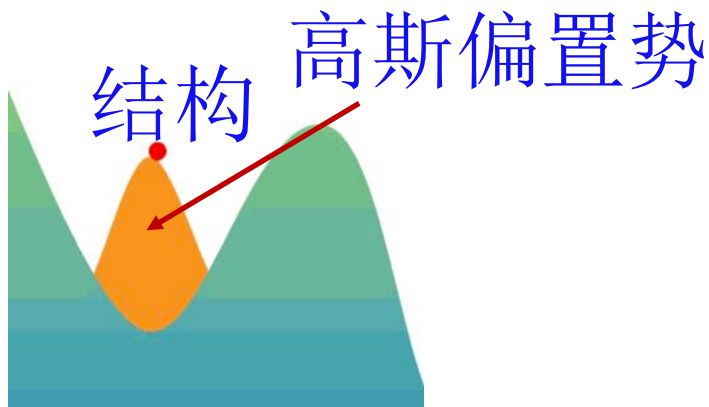
关键词	DESW.task	string	连路径
	DESW.task	TS	连路径+优化TS
	DESW.task	optpath	连路径+优化路径+优化TS

LASP 使用入门3 – 过渡态搜索初级

总控制关键词

DESW.ds	0.2	Ang	设定DWSW步长	对于路径很短的反应，可改小DESW.ds
DESW.optpath_cycle	4		设定优化路径循环数	
CBD.maxcycle	20		设定优化TS循环数	
CBD.TSftol	0.1		设定优化TS的收敛精度	(原子最大力 eV/Ang)
CBD.strftol	0.1		设定优化TS的收敛精度	(晶体应力 GPa)
SSW.output	T		设定lasp.out输出的多少	
SSW.printevery	F		设定是否输出每一步的结构和力	

LASP 使用入门3 – 过渡态搜索初级



控制行走方向精度

- 行走方向由IS/FS两端实时更新
- 利用约束旋转双子法（CBD）优化行走方向

控制行走方向主要关键词

```
SSW.DimerdR      0.0050
SSW.RotMaxStep_preRot      8
SSW.RotMaxStep      18
SSW.Rotftol_preRot      1.0000
SSW.Rotftol      0.1000
```

控制双子优化mode精度

SSW.Rotftol **0.01 ~ 0.1**

SSW.Rotftol_preRot **0.5~1.0**

对于虚频接近0的TS（soft TS），
可以尝试改小SSW.Rotftol

LASP 使用入门3 – 过渡态搜索初级

准备输入结构文件 uncm.arc; input.arc; lasp.in (其他为和PES相关文件)

input.arc 文件里面有一个结构，一般是IS

```
17:02:30:[zpliu@storage3 NN-5]$ ll
total 112K
lrwxrwxrwx 1 zpliu zpliu 18 Jun 4 17:46 uncm.arc -> sourcedir/uncm.arc
lrwxrwxrwx 1 zpliu zpliu 17 Jun 4 17:46 lasp.in -> sourcedir/lasp.in
lrwxrwxrwx 1 zpliu zpliu 19 Jun 4 17:46 input.arc -> sourcedir/input.arc
lrwxrwxrwx 1 zpliu zpliu 18 Jun 4 17:46 CHON.pot -> sourcedir/CHON.pot
-rw----- 1 zpliu zpliu 0 Jun 4 17:46 nohup.out
-rw-rw-r-- 1 zpliu zpliu 0 Jun 9 15:57 z
```

uncm.arc 文件里面有两个结构，一个是IS，一个是FS (不一定是需要优化的)
注意：原子需要一一对应

```
17:13:07:[zpliu@storage3 NN-5]$ cat uncm.arc
|BIOSYM archive 2
PBC=ON
React 1 1 -1335.4875956 -1335.4875956
|DATE
PBC 15.0000 15.0000 15.0000 90.0000 90.0000 90.0000
H 3.144160760 4.517488769 6.756447451 CORE 1 H H 0.0000 1
H 3.283939812 2.651288474 6.678731676 CORE 2 H H 0.0000 2
H 5.596489157 2.869418544 5.804940015 CORE 3 H H 0.0000 3
H 6.663678005 5.186591815 5.762493313 CORE 4 H H 0.0000 4
H 5.125262368 5.906143482 6.339914284 CORE 5 H H 0.0000 5
H 2.125315930 4.905870300 3.098265313 CORE 6 H H 0.0000 6
H 3.575335246 3.710735357 3.102529396 CORE 7 H H 0.0000 7
H 3.523704793 6.570586555 4.359380806 CORE 8 H H 0.0000 8
C 5.018270423 3.760641652 6.078727728 CORE 9 C C 0.0000 9
C 3.915436135 5.595886110 4.027892549 CORE 10 C C 0.0000 10
C 3.157740732 4.682453702 3.375488562 CORE 11 C C 0.0000 11
C 3.750282281 3.630455282 6.543086063 CORE 12 C C 0.0000 12
C 5.566495745 5.117793255 5.703135701 CORE 13 C C 0.0000 13
O 5.266654611 5.386893703 4.285289141 CORE 14 O O 0.0000 14
end
end
React 1 2 -1335.4875956 -1336.5710057
|DATE
PBC 15.0000 15.0000 15.0000 90.0000 90.0000 90.0000
H 3.144160760 4.517488769 6.756447451 CORE 1 H H 0.0000 1
H 3.010391122 3.101706762 5.934107924 CORE 2 H H 0.0000 2
H 5.463107657 2.875164776 5.735325439 CORE 3 H H 0.0000 3
H 6.873034983 4.546433673 6.800129624 CORE 4 H H 0.0000 4
H 5.451696901 5.762263561 6.872310103 CORE 5 H H 0.0000 5
H 2.234067776 4.235094530 3.947014943 CORE 6 H H 0.0000 6
H 3.860660375 3.615131427 3.505464637 CORE 7 H H 0.0000 7
H 3.216976521 6.522536252 4.451976265 CORE 8 H H 0.0000 8
C 5.023626124 3.841727937 6.014177473 CORE 9 C C 0.0000 9
C 3.759024520 5.740272560 3.850574344 CORE 10 C C 0.0000 10
C 3.318979905 4.317934153 4.156960399 CORE 11 C C 0.0000 11
C 3.556447807 4.024611797 5.673831366 CORE 12 C C 0.0000 12
C 5.820569016 4.768449809 6.599616539 CORE 13 C C 0.0000 13
O 4.651214584 6.062278980 3.059462504 CORE 14 O O 0.0000 14
end
end
```

用户自己做uncm.arc: 可以利用MS画结构，并存为car文件格式，贴到uncm.arc

LASP 使用入门3 – 过渡态搜索初级

查看结果 **lasp.out** 检索List得到DESW路径

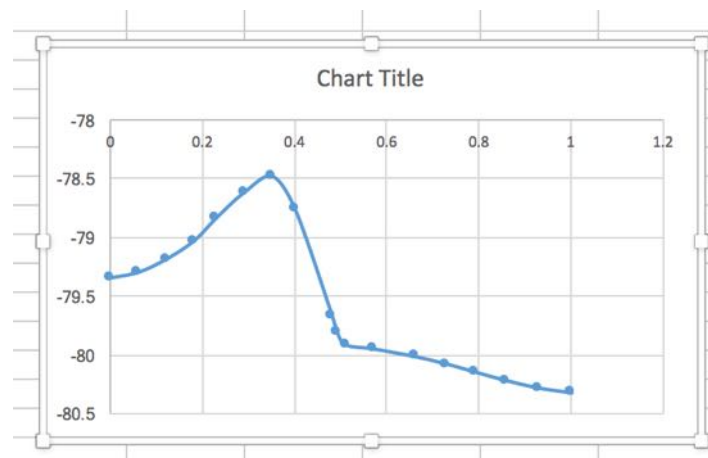
奇数：由IS (1) 出发的结构

偶数：由FS (2) 出发的结构

999 相遇的点频率未计算

第3列对第5列作图
(可copy到Excel)

```
16:45:06:[zpliu@storage3 NN-5]$ grep List lasp.out
List      1  0.00    2.38   -79.3424    0.008    0.002
List      3  0.06    2.74   -79.2927    0.195   -0.274
List      5  0.12    3.28   -79.1824    0.304   -0.488
List      7  0.18    3.61   -79.0263    0.395   -0.555
List      9  0.23    3.20   -78.8259    0.515   -0.814
List     11  0.29    3.42   -78.6113    0.723   -0.392
List     13  0.35    0.78   -78.4775    0.473   -0.721
List     15  0.40    0.65   -78.7624    2.418    0.080
List     17  0.48    999.00  -79.6561    1.090  999.000
List     18  0.49    999.00  -79.7995    0.558  999.000
List     16  0.51    2.17   -79.9127    0.369   -0.393
List     14  0.57    0.48   -79.9470    0.597   -0.103
List     12  0.66    0.07   -80.0126    0.445   -0.137
List     10  0.73    0.36   -80.0771    0.388   -0.244
List      8  0.79    0.77   -80.1437    0.544   -0.230
List      6  0.86    0.67   -80.2185    0.362   -0.221
List      4  0.93    0.65   -80.2811    0.323   -0.174
List      2  1.00    0.75   -80.3207    0.008    0.001
16:45:13:[zpliu@storage3 NN-5]$
```



DESW路径能量图

反应坐标0到1

对应结构在反应
坐标上的频率

路径能量IS到FS

对应结构的最大力

LASP 使用入门3 – 过渡态搜索初级

查看结果

lasp.out 检索MaxP得到DESW路径最高点能量

```
16:45:13:[zpliu@storage3 NN-5]$ grep MaxP lasp.out
  1 IS/MaxP/FS      -79.34235      -78.47753      -80.32070      0.865
16:56:33:[zpliu@storage3 NN-5]$
```

lasp.out 检索TS得到过渡态

```
16:56:33:[zpliu@storage3 NN-5]$ grep TS lasp.out
Start to Construct TS class
begin TSsearch
TS information      -78.555444  -7.400326  0.009516  0.000000  0.000000
  1 IS/TS/FS      -79.34235   -78.55544  -80.32070  0.787
```

TS原子最大力

TS虚频率值

TS能量

能垒

LASP 使用入门3 – 过渡态搜索初级

查看结果

查看结构

SSWpath.arc

TSstr.arc

TSmode.arc

DESW路径结构

TS结构

TS 对应反应虚频的结构动画

利用Material Studio 查看arc文件，可动画放映！

