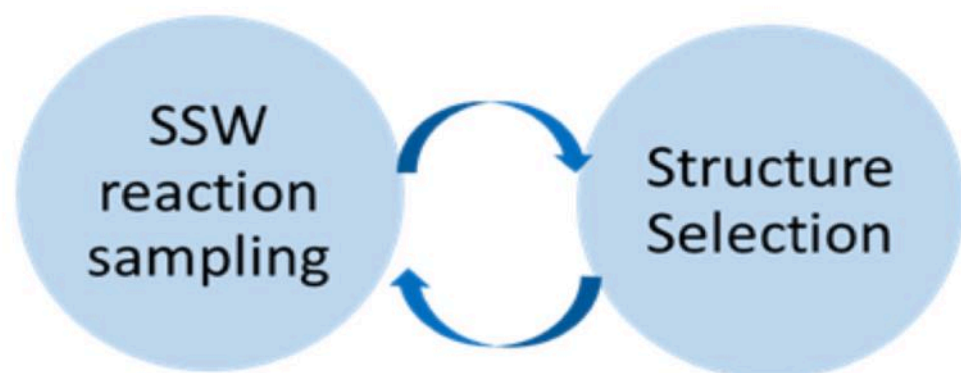


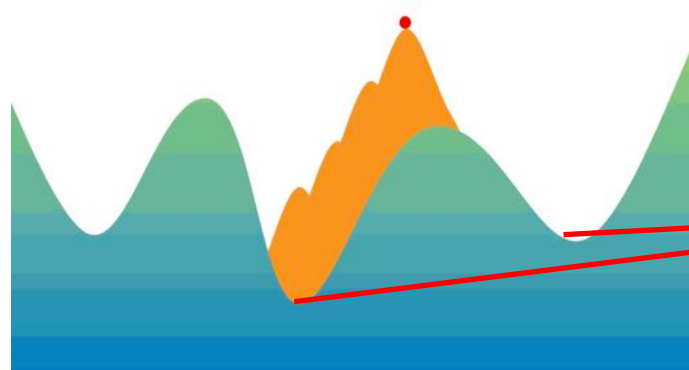
LASP 使用入门6 – 自动反应搜索初步

SSW-RS: 利用SSW轨迹连续（原子匹配度高）的特性，输出发生**反应的SSW步骤**的前后两帧极小结构（minimum），进而可用两点法DESW搜索反应路径



SSW-RS 包含

- **SSW**
- **结构判断**
- **输出反应对**



反应对输出到

uncm.arc

LASP 使用入门6 – 自动反应搜索初步

LASP 关键词:

可变晶包

Run_type 15

SSW.Pathway T

不变晶包

Run_type 5

SSW.Pathway T



```
# for SSW search start
SSW.Temp 100
SSW.DimerdR 0.01
SSW.ds_atom 0.6
SSW.NG 9
SSW.inirod 1
SSW.ftol 0.1
SSW.Ratio_Local 100

SSW.output F
SSW.printevery F
```

SSW的相关参数
基本全部起作用

SSW.Temp 1000 可以写很大
反应物构象选择

LASP 使用入门6 – 自动反应搜索初步

可变晶包：固固相变；成核生长

- 有关固固相变路径在后续教程继续

需跟踪SSW过程中固体结构是否变化

- 可采用结构有序度参量 (distance-weighted Steinhard order parameter)

SSW.LfixQ T
SSW.longQ T

检查长程的有序度参量

- 可采用晶体结构的空间群

SSW.Lfixsymm T 检查晶体空间群

也可以检查能量，如 SSW.Lfixene T

LASP 使用入门6 – 自动反应搜索初步

固定晶包：分子反应；表面催化；表面重构

NN-3 example

```
Run_type 5 # 12 for VC_DESW
# 15 for SSW_cry
# 2 for DESW
# 5 for SSW
# 6 for ranMC_S
# 16 for ranMC_

SSW.SSWsteps 20 # 0 single p
# 1 stru opt
# > 1 SSW gl

SSW.Pathway T
SSW.Lfixene F
SSW.Lfixsymm F
SSW.Lfixslab F
SSW.Lfixchiral T
SSW.Lfixbond T
SSW.LfixQ F
SSW.longQ T
SSW.fixQ 0
SSW.energy_window 2.0000
SSW.energy_tol 0.1000
```

SSW.SSWsteps 1000 SSW步数，肯定是越多越好

判别分子反应需 跟踪分子结构变化

SSW.Lfixchiral T 检查分子手性

SSW.Lfixbond T 检查分子成键矩阵

也可以检查**能量**，如 **SSW.Lfixene T**
但是分子间力（H-bonding）会导致能量变化大，
一般很难通过能量判据判别是否是同一个分子

LASP 使用入门6 – 自动反应搜索初步

结果分析1 -- all.arc

采用国际分子命名法，分析all.arc

```
-rw-rw-r-- 1 zpliu zpliu 26K Jun 5 16:31 all.arc
23:29:24:[zpliu@storage3 NN-3]$ hminimum
-----
ID      E/eV    Conv    Molecular in Cell
-----
0       -79.35  0.009  C(=C)COC=C
1       -79.32  0.079  C(=C)COC=C
2       -79.24  0.099  C(=C)COC=C
3       -79.27  0.087  C(=C)COC=C
4       -79.36  0.098  C(=C)COC=C
5       -79.23  0.086  C(=C)COC=C
6       -78.66  0.088  [CH](=C)=O + [CH](=C)=C
7       -79.40  0.100  C(=C)COC=C
8       -80.16  0.076  C(=C)CCC=O
9       -79.46  0.091  C(=C)COC=C
10      -78.00  0.086  C(=C)COCC
11      -80.14  0.096  C(=C)CCC=O
12      -80.16  0.097  C(=C)CCC=O
13      -79.22  0.094  C(=C)COC=C
14      -79.28  0.084  C(=C)COC=C
15      -79.18  0.085  C(=C)COC=C
16      -79.31  0.095  C(=C)COC=C
17      -79.33  0.093  C(=C)COC=C
18      -79.45  0.075  C(=C)COC=C
19      -79.34  0.098  C(=C)COC=C
-----
```

NN-3 example

运行NN-3，分析all.arc的分子，可以发现SSW找到了不同产物（有的其实是同一个分子的不同构象），其中与初始结构（input.arc）**成键不同**（由SSW.Lfixchiral和SSW.Lfixbond联合决定）的结构，输出到uncm.arc文件

```
[zpliu@storage3 NN-3]$ grep Energy uncm.arc
Energy      6      -79.2343      -79.234317      C1
Energy      6      -79.2343      -78.664519      C1
Energy      8      -79.4026      -79.402562      C1
Energy      8      -79.4026      -80.163536      C1
Energy     10      -79.4559      -79.455926      C1
Energy     10      -79.4559      -77.998547      C1
Energy     11      -79.4559      -79.455926      C1
Energy     11      -79.4559      -80.137940      C1
Energy     12      -79.4559      -79.455926      C1
Energy     12      -79.4559      -80.159314      C1
```

LASP 使用入门6 – 自动反应搜索初步

结果分析2 -- uncm.arc

```
01:16:16:[zpliu@storage3 molecule-PathwaySampling-SSWRS]$ grep 'Energy' 8' uncm.arc -A 18
Energy      8      -79.4026      -79.402562      C1
IDATE
PBC 15.00000000 15.00000000 15.00000000 90.00000000 90.00000000 90.00000000
H 6.767285555 7.396508114 10.315018131 CORE 1 H H 0.0000 1
H 6.428899296 5.602364513 9.959644942 CORE 2 H H 0.0000 2
H 7.871726168 5.742577691 7.926207900 CORE 3 H H 0.0000 3
H 9.528265276 7.788694691 8.422421925 CORE 4 H H 0.0000 4
H 8.062593863 8.733686449 8.705043071 CORE 5 H H 0.0000 5
H 7.887458003 7.661925745 4.234651988 CORE 6 H H 0.0000 6
H 6.121078530 8.241000692 4.364408393 CORE 7 H H 0.0000 7
H 6.436898900 8.563594955 6.837637347 CORE 8 H H 0.0000 8
C 7.728198851 6.601025218 8.595092194 CORE 9 C C 0.0000 9
C 7.236857594 8.225806325 6.169863662 CORE 10 C C 0.0000 10
C 7.067966403 8.020508900 4.855939126 CORE 11 C C 0.0000 11
C 6.942735619 6.524221294 9.680067307 CORE 12 C C 0.0000 12
C 8.457346421 7.848683959 8.172150717 CORE 13 C C 0.0000 13
O 8.462689521 8.049401455 6.761853298 CORE 14 O 0.0000 14
end
end
Energy      8      -79.4026      -80.163536      C1
IDATE
PBC 15.00000000 15.00000000 15.00000000 90.00000000 90.00000000 90.00000000
H 6.157111396 5.996757419 8.053742792 CORE 1 H H 0.0000 1
H 7.269300199 5.785481117 6.736256631 CORE 2 H H 0.0000 2
H 8.589057325 5.703758990 8.794799534 CORE 3 H H 0.0000 3
H 9.603315658 7.749959883 9.558305216 CORE 4 H H 0.0000 4
H 8.378170816 8.785417759 8.647323551 CORE 5 H H 0.0000 5
H 5.612184023 7.528855453 6.205365374 CORE 6 H H 0.0000 6
H 6.031654345 8.442059729 7.638067905 CORE 7 H H 0.0000 7
H 7.078280615 9.579629744 5.746508285 CORE 8 H H 0.0000 8
C 8.152918818 6.658904952 8.467954377 CORE 9 C C 0.0000 9
C 7.427856766 8.556662290 6.066586955 CORE 10 C C 0.0000 10
C 6.450721202 7.766125842 6.876518090 CORE 11 C C 0.0000 11
C 6.986420739 6.502700893 7.526064628 CORE 12 C C 0.0000 12
C 8.723022106 7.788519036 8.917111855 CORE 13 C C 0.0000 13
O 8.539985994 8.155166892 5.765394808 CORE 14 O 0.0000 14
end
end
```

- 利用MS查看uncm.arc动画;
- 提取uncm.arc中的相关反应对;
- 再利用DESW方法进行反应路径搜索, 并确定反应过渡态

以上所有过程可以通过**脚本程序**自动提交SSW-RS作业, 自动DESW, 自动分析路径。后续LASP版本将提供这些脚本程序