

如何使用 Materials Studio 進行 transition state search calculation

Part 1. 產生欲進行計算的 Trajectory 檔案

a. 載入結構：

1. 首先開啓 Materials Studio 程式後，指定好要開啓的 project。
2. 在名稱爲 "Project" 的視窗中，將游標指在剛剛建立好的資料夾名稱上按下右鍵，選擇 "Import" 指令進行載入欲進行 transition state search calculation 的反應物以及生成物的結構。
3. 將游標移至名稱爲 "Project" 的視窗中並在剛才載入的生成物以及反應物的結構的名稱上，各自點擊兩下，以開啓結構檔案在右側的結構預覽視窗中。
4. 選擇最上方的功能選單中的 "Tool" 下拉選單裡面的 "Reaction Preview"，開啓後會在界面上產生一個新的視窗。

b. 在名稱爲 "Reaction Preview" 的新視窗中：

5. 使用游標按下在 "Reactant" 選項右方的下拉箭頭後可以看見先前載入的反應物的結構，點擊後即選定；同上，使用游標按下在 "Product" 選項右方的下拉箭頭後可以看見先前載入的生成物的結構，點擊後即選定。
6. 使用游標按下視窗下方的 "Match"，此一選項會開啓的功能，是要比對反應前後的反應物以及生成物的結構，其中包含的原子各自的位置對應關係。按下後會開啓一名稱爲 "Find Equivalent Atoms" 的新視窗，在此新視窗中可以分爲左邊爲反應物而右邊爲生成物中各包含哪些原子的預覽窗格；其中在綠色資料夾裡面的是已經比對完成的原子，而在紅色資料夾中的則是尚未比對完成的原子。
7. 此時可以使用下方的 "Auto Find" 功能進行自動比對，或是在上方反應物以及生成物個別的預覽窗格的紅色資料夾中自己選定想要比對的原子 (每次的反應物以及生成物中的原子各自都只能選擇一顆)，使用游標按下下方的 "Set Match" 選項，即可完成一組反應物以及生成物中的原子比對，若是比對錯誤，可以使用游標按下 "Reset" 來復原先前的比對動作；如此逐次完成比對的工作直到紅色資料夾中再也沒有未比對完成的原子，即可關閉 "Find

Equivalent Atoms" 的視窗。

8. 此時回到名稱爲 "Reaction Preview" 的視窗中，其中的 "Number of frames" 可以選擇要產生的 Trajectory 的檔案所使用的連續動作的畫面張數，而 "Base preview on reactant" 以及 "Base preview on product" 則是用來選擇要產生的 Trajectory 的檔案的初始畫面是反應物或是生成物的結構。使用游標按下視窗下方的 "Preview"，就會產生一個名稱爲 "反應物名稱-生成物名稱" 的新視窗，在名稱爲 "Project" 的預覽窗格中也會出現一個 "反應物名稱-生成物名稱" 的新檔案。

Part 2。進行計算

9. 將游標移至名稱爲 "Project" 的視窗中並在剛才產生的名稱爲 "反應物名稱-生成物名稱" 的新檔案上，點擊兩下，以開啓結構檔案在右側的結構預覽視窗中。

10. 使用游標按下在 "Toolbar" 中的 "Calculation" 開啓名稱爲 "CASTEP Calculation" 的新視窗，在 "Setup" 的子選項的 "Task" 中選擇 "TS Search" 功能，並且可使用游標按下於後方的 "More" 會跳出一新視窗，在其中可以選擇欲使用的計算方式 (如 LST 或是 QST) 以及計算結果的 Quality

11. 如果在 "Setup" 中設定無誤，則可以到 "Job Control" 的子選單中的 "Gateway location" 選擇預先設定好的 Gateway Server 位址後，按下下方的 "Run" 按鈕即可進行 transition state search calculation。

[回到首頁](#)

2003.11.23