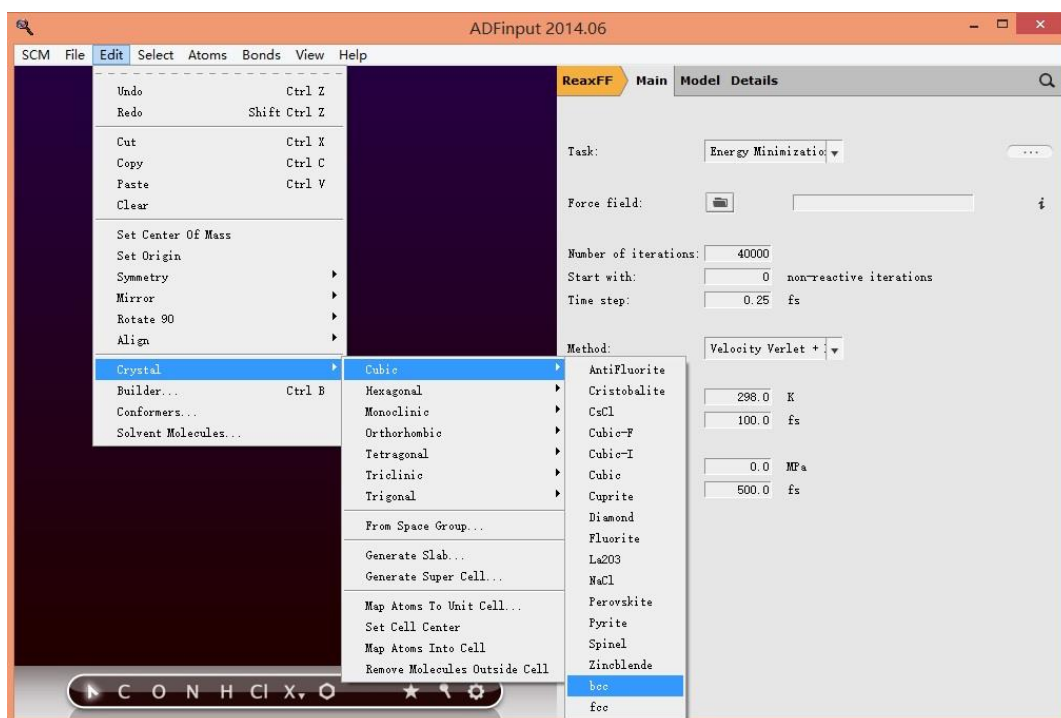
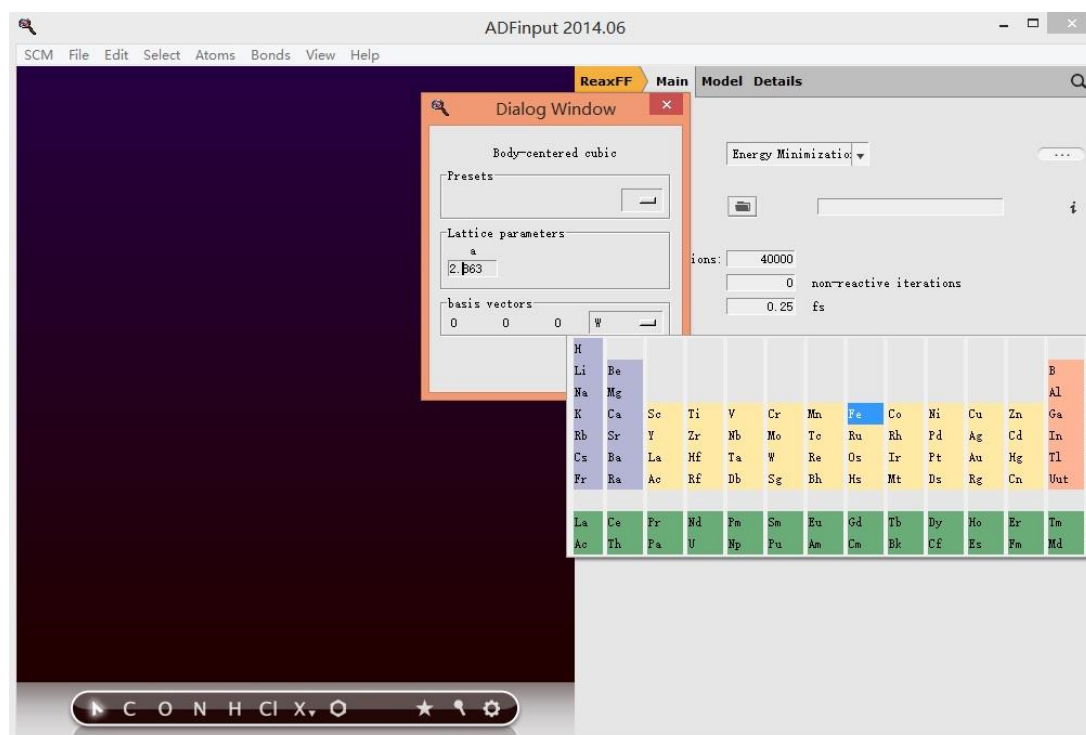


如何实现原子、分子入射的功能

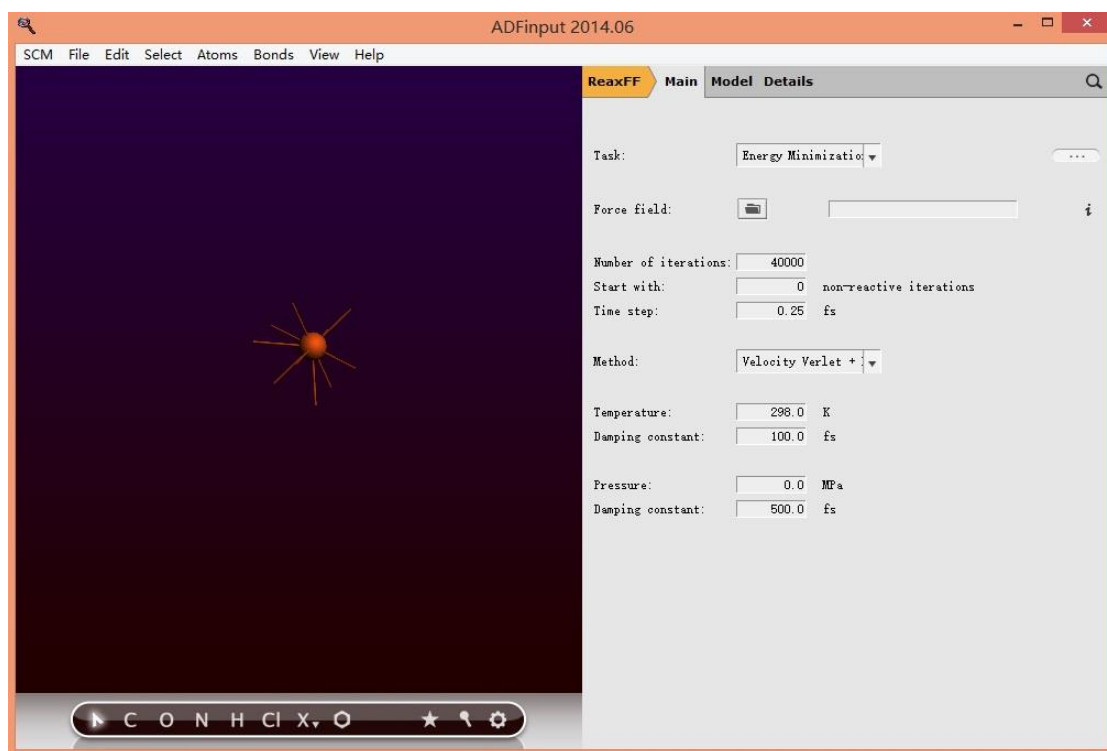
这里以铁表面入射水分子作为例子，如果是原子入射则更简单。

1，创建 Fe 体心立方晶体（也可以直接从网上或数据库中的*.cif 文件，通过 File - Import Coordinates 的方式直接导入）：

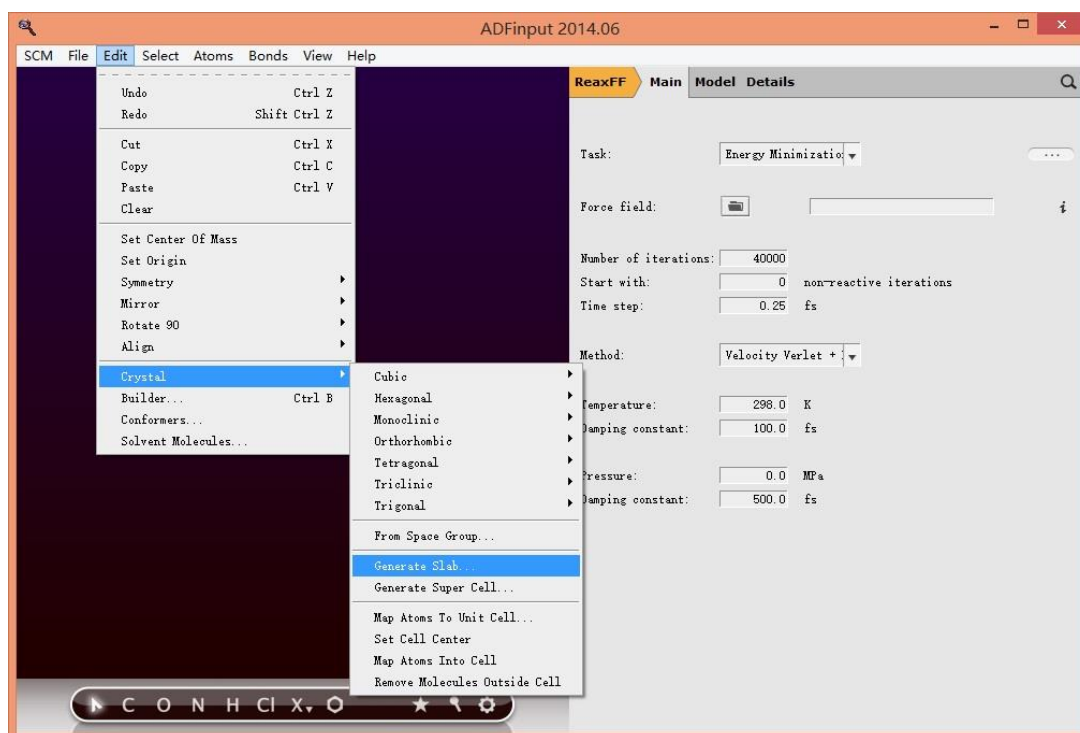




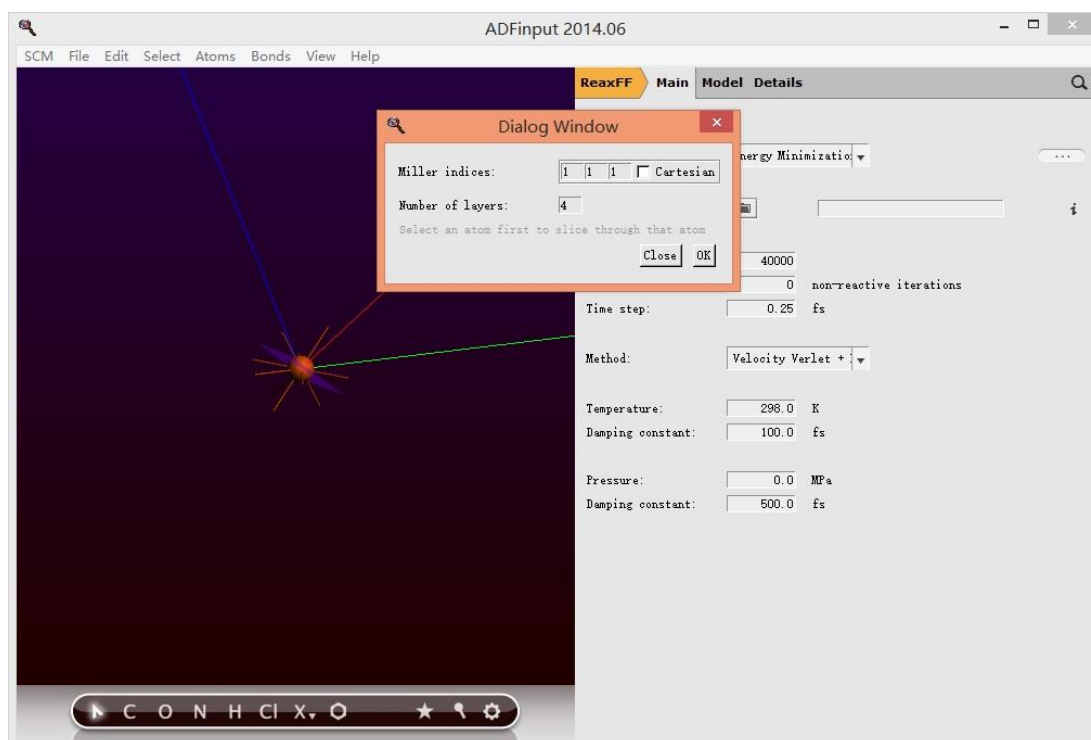
得到单质 Fe 晶体（只显示原胞中的一个原子）



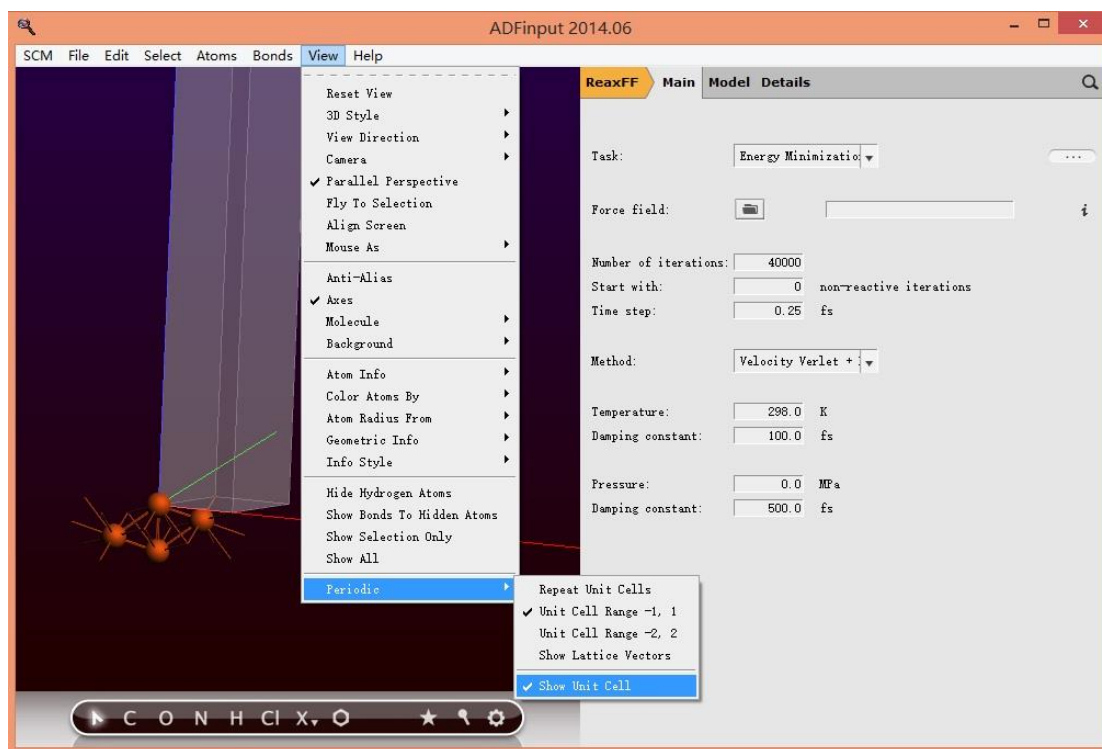
从晶体切割出一个表面（2 层）



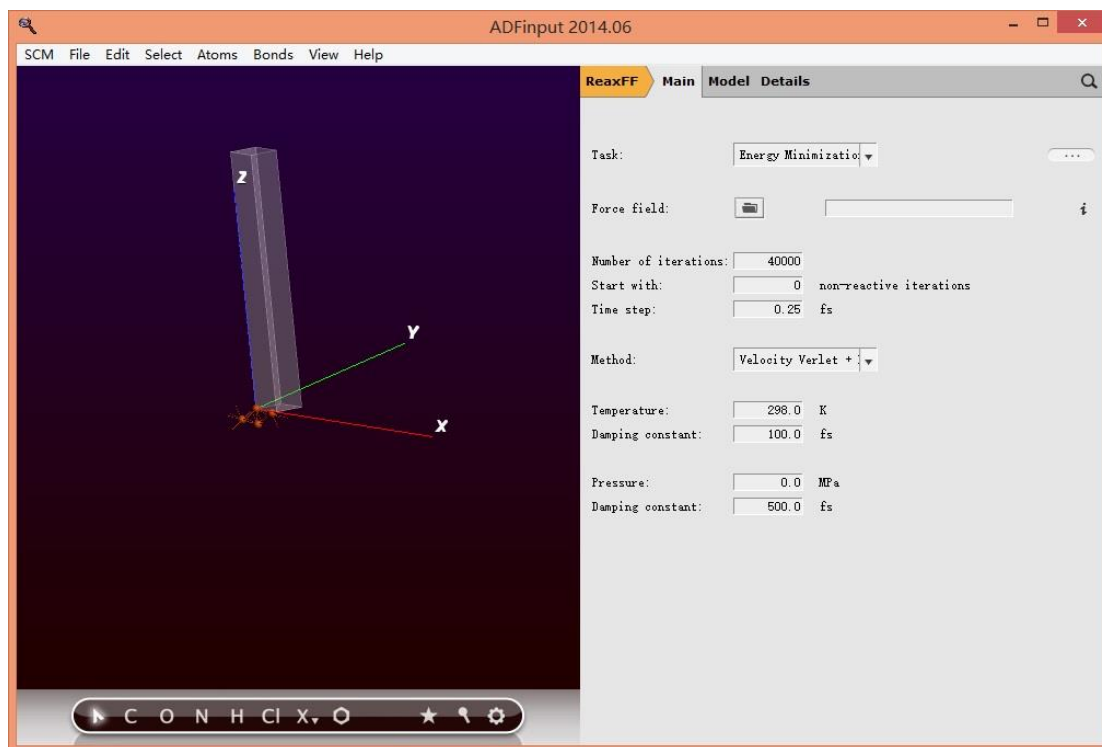
沿着密勒指数 **111** 的面切 2 层



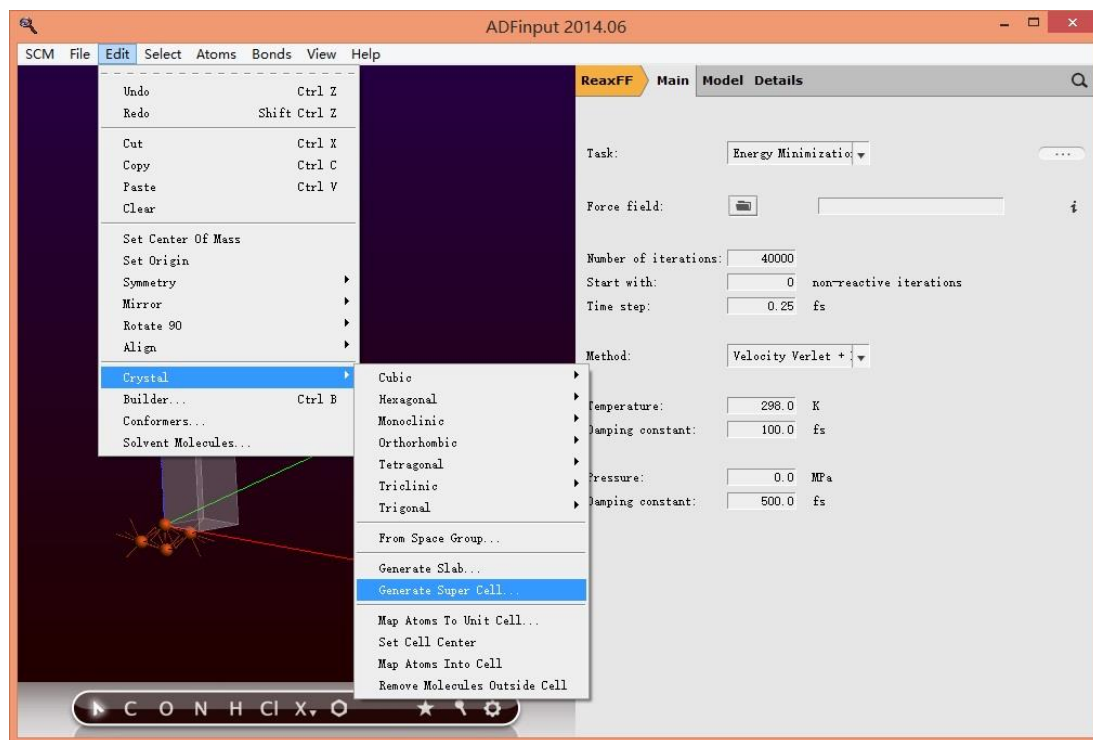
显示分子动力学盒子的方向



同时点击 view-Axes，显示坐标轴：

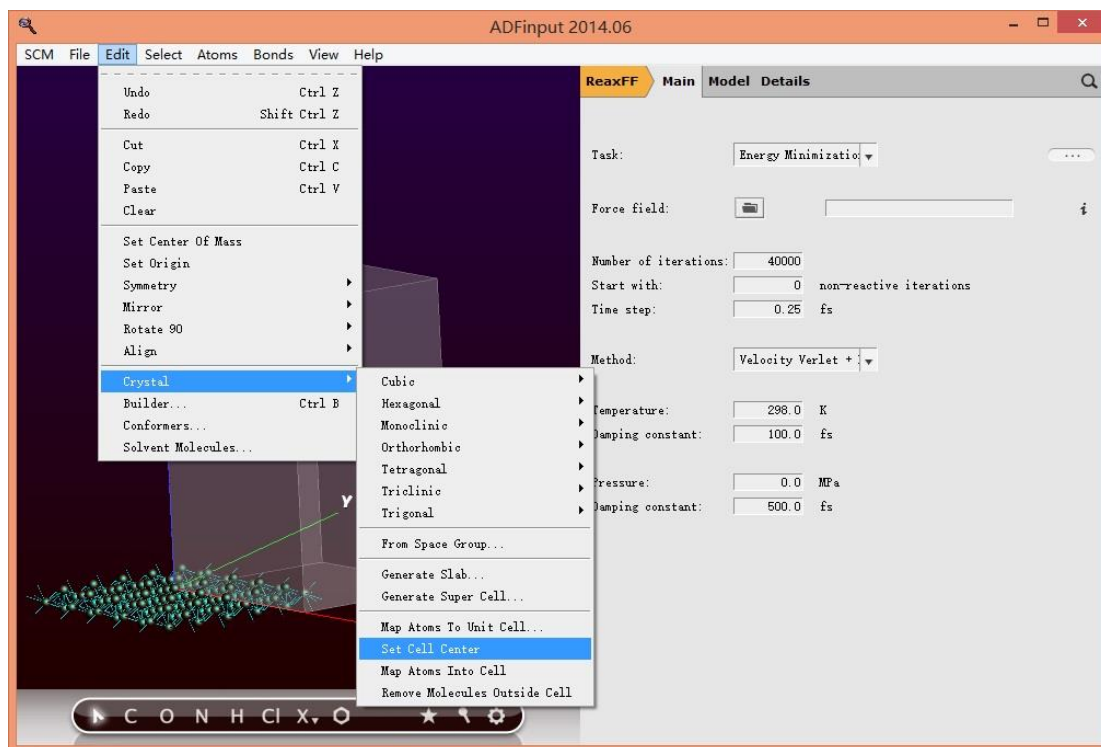


因为现在盒子只有 2 个原子，体系太小。我们要沿着薄膜的方向（即沿着 x,y 方向，因为 z 方向上空为真空）做二维延展的超胞（关于超胞、密勒指数等晶体学概念，如果不清楚，请参看黄昆、韩汝琦的《固体物理学》第一章）：



设置为 5,5,1，表示 x、y 方向分别重复 5 次，z 方向不重复，维持原状。

为了方便观看，将原子挪到盒子中央去（其实不挪动也是一样的，因为盒子本身是三维周期性重复的，换句话说，现在我们看到的是一个盒子里面一层 Fe 薄膜，而实际上是无限层，每层无限大——这就是三维周期的直观含义）：



这样所有原子都会移动到盒子的中央。Fe 薄膜的也就建好了。

2, 创建入射分子：

本例中，要入射的分子是水分子，因此我们需要事先要得到水分子的 XYZ 坐标，参考[如何](#)

[优化分子的几何结构](#)：

3

O	-0.56070669	-1.55395854	-0.00000000
H	-0.49546319	-1.82020171	0.92003145
H	-0.75643720	-0.61537121	-0.04840855

其中第一个数字 3 表示有 3 个原子，接下来 3 行是水分子的每个原子的 xyz 坐标。

3, 基本的反应分子动力学参数设置：

一切就绪，那么现在就要设置动力学过程了。动力学模拟的设置参考“[ReaxFF 的基本上使用“甲烷燃烧的反应分子动力学模拟”（土豆视频）](#)”

基本的动力学设置与普通的分子动力学模拟没有太大差别，无非是步数、步长、系综、温度、压强之类。设置好之后，保存任务，即产生一个*.run 文件。

4, 入射的设置：

需要在保存任务生成的*.run 文件中进行设置。

下面是一个设置的范本：

在 cat > geo <<eor 的前面，增加如下几行：

```
cat > addmol.bgf <<eor
```

```
BIOGRF 200
```

```
DESCRP Water
```

```
FREQADD 1000
```

VELADD 2

STARTX -9000

STARTY -9000

STARTZ -9000

ADDIST 3.0

NATTEMPT 050

TADDMOL 250.0

FORMAT ATOM (a6,1x,i5,1x,a5,1x,a3,1x,a1,1x,a5,3f10.5,1x,a5,i3,i2,1x,f8.5)

HETATM	1	O	-0.56070	-1.55395	-0.00000	O	0	0
--------	---	---	----------	----------	----------	---	---	---

0.00000

HETATM	2	H	-0.49546	-1.82020	0.92003	H	0	0
--------	---	---	----------	----------	---------	---	---	---

0.00000

HETATM	3	H	-0.75643	-0.61537	-0.04840	H	0	0
--------	---	---	----------	----------	----------	---	---	---

0.00000

eor

cat > addmol.vel <<eor

Atom velocities (Angstrom/s):

0.676920600871422E+13 -0.4000000000000001E+15 0.685204179579294E+03

eor

上面这些内容依次解释如下：

BIOGRF，这是 bgf 文件格式的版本号，这个一般不能改，除非非常熟悉不同的版本；

DESCRP，这是取名字，随便取就可以；

FREQADD, 每隔多少步, 射入一个分子, 例如 1000 的话, 那么每 1000 步将入射一个分子;

VELADD, 这是设置入射分子的速率的, 如果设置为 1, 则表示随机; 如果设置为 2, 则表示将从

```
cat > addmol.vel <<eor
```

Atom velocities (Angstrom/s):

```
0.676920600871422E+13 -0.4000000000000001E+15 0.685204179579294E+03
```

```
eor
```

读取 (上面这 4 行的含义, 后面会讲到)。这个关键字似乎也作废了。

STARTX、STARTY、STARTZ 这是设置入射坐标的, 例如设置为 0.0、0.0、0.0(注意必须写成小数的样式), 那么这分子每次都会从那个点入射进来。事实上精确的入射坐标是入射分子的每个原子 x、y、z 坐标分别加上这三个数 (即 $x+STARTX, y+STARTY, z+STARTZ$)。如果 STARTX、STARTY、STARTZ 小于 -5000 则表示入射位置随机分布;

ADDIST, 分子入射时, 与现有部分的最小距离 (单位为 Angstrom), 如果设置为负数, 则表示不检查这个指标 (可能会产生不合理的结构);

NATTEMPT, 这个参数本来是用来设置入射分子的总个数, 但似乎作废了;

TADDMOL, 这是设置入射分子的温度的, 入射分子的速率与温度之间有个玻尔兹曼热力学分布的换算关系, 比如 250K 的分子速率肯定比 200K 的分子速率低;

FORMAT ATOM, 这一行最好是复制、粘贴, 因为容易出现字符问题, 这一行整行不要去改动它;

```
HETATM      1  O                  -0.56070  -1.55395  -0.00000      O  0  0
0.00000
```



```
HETATM      2  H                -0.49546  -1.82020   0.92003      H  0  0
0.00000
```

```
HETATM      3  H                -0.75643  -0.61537  -0.04840      H  0  0
0.00000
```

这一行挨个说一下：第一列 HETATM 照抄，这是表示后面跟的是原子坐标；第二列是原子的序号，第三列是元素符号，第 4,5,6 列是原子的坐标，第 7 列是元素符号，后面三列在 ReaxFF 中不起作用。

需要非常注意的是：最好是直接复制这些数据，然后直接在上面修改，保证字符对齐方式与上面的格式相同，因为 Fortran 读取数据的时候，对格式要求较为严格，例如-0.75643，表示小数点后只能有 5 位小数，如果留 6 位，可能会报错。

如果入射的不是分子，而是一个原子，那么就很简单：

```
HETATM      3  Si                0.00000   0.00000   0.00000      Si  0  0
0.00000
```

```
cat > addmol.vel <<eor
```

Atom velocities (Angstrom/s):

```
0.676920600871422E+13 -0.4000000000000001E+15 0.685204179579294E+03
```

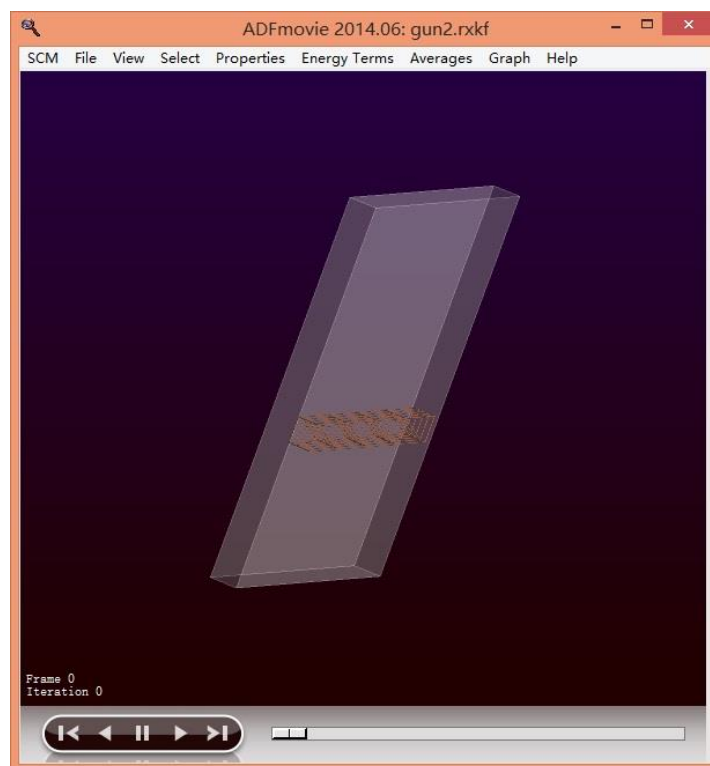
```
eor
```

cat > addmol.vel «eor 这句话是指，将下文直到 eor 为止的内容（此例中也就是中间的两行）写入一个名为 addmol.vel 的文件中

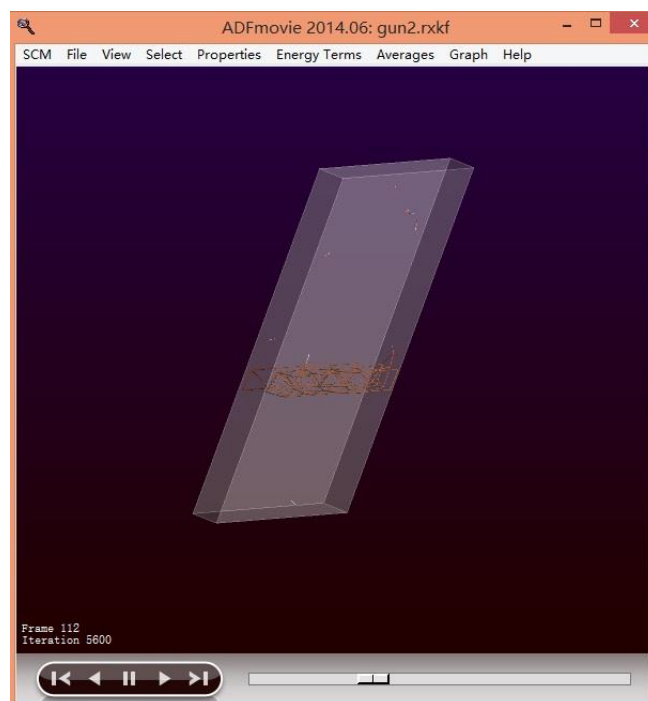
这个 addmol.vel 文件就是用来设置入射原子、分子的平动速率的。注意单位是 Angstrom/s 因此这个数字一般换算成 Angstrom/fs，我们才有感觉，因为分子动力学每个 step 默认是 0.25fs，其中 1000fs=1ns。

5，保存任务，并运行，我们得到：

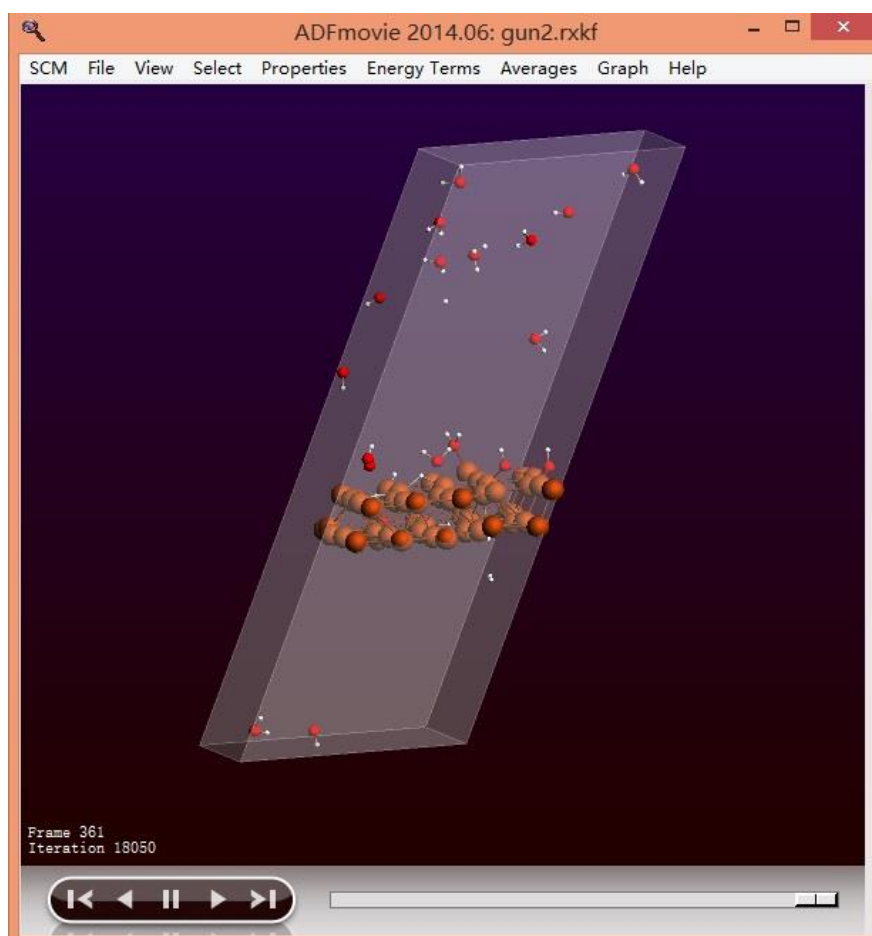
第 0 step：



第 5600 step：



第 18050 step：



结束。