

QTST v1.4 使用手册

目录

- [QTST v1.4 使用手册](#)
 - [目录](#)
- [1. 安装方法](#)
 - [1.1. Windows](#)
 - [1.1.1. 方法1：下载预编译的二进制文件](#)
 - [1.1.2. 方法2：使用GCC编译器编译源码](#)
 - [1.1.3. 方法3：使用Microsoft Visual Studio编译源码](#)
 - [1.2. Linux](#)
 - [1.2.1. 方法1：下载预编译的二进制文件](#)
 - [1.2.2. 方法2：使用GCC编译器编译源码](#)
 - [1.3. MacOS](#)
 - [1.3.1. 使用Clang编译器编译源码](#)
 - [1.4. Android](#)
 - [1.4.1. 借助C4droid使用源码](#)
- [2. 计算输入](#)
 - [2.1. 量子隧道效应透射系数](#)
 - [2.1.1. Wigner方法](#)
 - [2.1.2. 近似的Skodje-Truhlar方法](#)
 - [2.1.3. 完整的Skodje-Truhlar方法](#)
 - [2.1.4. 全部计算](#)
 - [2.2. 单分子反应速率常数](#)
 - [2.2.1. 自由能方法](#)
 - [2.2.2. 配分函数方法](#)
 - [2.2.3. 全部计算](#)
 - [2.3. 双分子反应速率常数](#)
 - [2.3.1. 自由能方法](#)
 - [2.3.2. 配分函数方法](#)
 - [2.3.3. 全部计算](#)
- [3. 计算输出](#)
 - [3.1. 量子隧道效应透射系数](#)
 - [3.1.1. Wigner方法](#)
 - [3.1.2. 近似的Skodje-Truhlar方法](#)
 - [3.1.3. 完整的Skodje-Truhlar方法](#)
 - [3.1.4. 全部计算](#)
 - [3.2. 单分子反应速率常数](#)
 - [3.2.1. 自由能方法](#)
 - [3.2.2. 配分函数方法](#)
 - [3.2.3. 全部计算](#)
 - [3.3. 双分子反应速率常数](#)
 - [3.3.1. 自由能方法](#)

- [3.3.2. 配分函数方法](#)
- [3.3.3. 全部计算](#)

1. 安装方法

QTST v1.4 可在[官方网站](#)下载。

1.1. Windows

1.1.1. 方法1：下载预编译的二进制文件

下载Windows预编译的二进制文件QTST_1_4_win_binary.zip，解压后直接运行。

1.1.2. 方法2：使用GCC编译器编译源码

下载[mingw64-gcc](#)。

安装gcc 4.6以上版本。

将mingw64/bin目录加入PATH： [方法教程](#)

下载源码，将make_file文件夹中makefile.win64.mk复制到源码文件夹，并修改文件名为makefile。

在当前目录下启动命令提示符或PowerShell，运行mingw32-make，编译完成将在当前目录下生成QTST.exe二进制文件。

运行QTST.exe即可。

1.1.3. 方法3：使用Microsoft Visual Studio编译源码

下载[Microsoft Visual Studio 2019](#)。

下载源码，通过文本编辑器（如：[Visual Studio Code](#), [Vim](#), [Notepad++](#)等）将源码的文字编码由UTF-8改为GBK。

使用Microsoft Visual Studio新建空项目，将源码的.cpp文件和.h文件分别导入空项目，然后编译整个项目，编译完成将生成二进制文件。

1.2. Linux

1.2.1. 方法1：下载预编译的二进制文件

下载Linux预编译的二进制文件QTST_1_4_linux_binary.tar.gz

使用tar -zxvf QTST_1_4_linux_binary.tar.gz解压。

进入文件夹赋予二进制文件可执行权限

```
cd QTST_1_4_linux_binary  
chmod +x QTST
```

使用./QTST启动软件

也可以将.../QTST_1_4_linux_binary目录加入PATH，直接在终端使用QTST启动软件。

1.2.2. 方法2：使用GCC编译器编译源码

要求安装有GCC 4.6以上版本，可以在终端中通过gcc -v来查看系统自带GCC编译器版本。

下载源码，将make_file文件夹中makefile.linux.mk复制到源码文件夹，并修改文件名为makefile。

在当前目录下启动终端，运行make，编译完成将在当前目录下生成QTST二进制文件。

运行./QTST即可。

1.3. MacOS

1.3.1. 使用Clang编译器编译源码

要求安装有Clang 3.1以上版本，可以通过clang --version来查看系统自带Clang编译器版本。

下载源码，将make_file文件夹中makefile.macos.mk复制到源码文件夹，并修改文件名为makefile。

在当前目录下启动终端，运行make，编译完成将在当前目录下生成QTST二进制文件。

运行./QTST即可。

1.4. Android

1.4.1. 借助C4droid使用源码

下载安装C4droid 5.96及以上版本，GCC for C4droid 6.1.0及以上版本，SDL plugin for C4droid 2.0.4及以上版本。

修改C4droid默认编译器为g++编译器，修改g++编译器参数-std=c++11或更高C++语言标准。

下载QTST_1_4_android.cpp文件，用C4droid打开，编译运行。

2. 计算输入

科学计数法/计算机科学计数法形式输入，如 1.5×10^{-5} 输入为1.5e-5。

2.1. 量子隧道效应透射系数

2.1.1. Wigner方法

输入参数表：温度、虚频

温度为反应时的温度。

支持单位：K, °C, °F

虚频为过渡态的负(虚)频率，通常写成负值。

支持单位：cm⁻¹, Hz

输入实例：

反应温度 $T = 300$ K，过渡态虚频 $\nu = -1000$ cm⁻¹

使用Wigner方法计算量子隧道效应透射系数。

```
=====
                QTST v1.4 量子过渡态动力学计算包
                Qiaosong Lin
                Wuhan University, 2019
若使用了本软件，请引用：
Q. Lin, QTST v1.4, https://github.com/Linqiaosong/QTST
=====

*请选择功能*
[1] 计算量子隧穿效应透射系数
[2] 计算单分子反应速率常数
[3] 计算双分子反应速率常数
1 #选择计算量子隧道效应透射系数
=====

*请选择计算方法*
[1] Wigner方法
[2] Skodje-Truhlar方法
[3] 全部计算
1 #选择使用Wigner方法
=====
```

```

=====
                *请输入信息*
科学计数法均按如下表示：
      2.5*10^-1表示为： 2.5e-1
=====
                *请输入温度T*
温度数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示
支持单位：
[1] 热力学温度(K)
[2] 摄氏度(C)
[3] 华氏度(F)
例：300.0 K输入：300.0 1
T=300 1 #输入温度300 K
=====
                *请输入虚频v*
虚频数值与单位之间用一个空格隔开，带负号，单位用标号表示
支持单位：
[1] 光谱学单位—波数(cm-1)
[2] 波的频率单位—赫兹(Hz)
例：-1000.0 cm-1输入：-1000.0 1
v=-1000 1 #输入过渡态虚频-1000 cm-1
=====
=====
                *计算量子隧穿效应透射系数κ输入信息*
温度T=300 K
虚频v=-1000 cm-1
生成过渡态的势垒ΔU=nan
放热方向校正系数V=nan
=====

```

输出结果见[3.1.1](#)。

2.1.2. 近似的Skodje-Truhlar方法

输入参数表：温度、虚频

温度为反应时的温度。

支持单位：K, °C, °F

虚频为过渡态的负(虚)频率，通常写成负值。

支持单位：cm⁻¹, Hz

输入实例：

反应温度 $T = 300$ K，过渡态虚频 $\nu = -1000$ cm⁻¹

使用近似的Skodje-Truhlar方法计算量子隧道效应透射系数。

=====

QTST v1.4 量子过渡态动力学计算包

Qiaosong Lin

Wuhan University, 2019

若使用了本软件, 请引用:

Q. Lin, QTST v1.4, <https://github.com/Linqiaosong/QTST>

=====

=====

请选择功能

[1] 计算量子隧穿效应透射系数

[2] 计算单分子反应速率常数

[3] 计算双分子反应速率常数

1 #选择计算量子隧穿效应透射系数

=====

=====

请选择计算方法

[1] Wigner方法

[2] Skodje-Truhlar方法

[3] 全部计算

2 #选择Skodje-Truhlar方法

=====

=====

请输入信息

科学计数法均按如下表示:

2.5×10^{-1} 表示为: 2.5e-1

=====

请输入温度T

温度数值与单位之间用一个空格隔开, 单位用标号表示

支持单位:

[1] 热力学温度(K)

[2] 摄氏度(C)

[3] 华氏度(F)

例: 300.0 K 输入: 300.0 1

T=300 1 #输入温度300 K

=====

请输入虚频v

虚频数值与单位之间用一个空格隔开, 带负号, 单位用标号表示

支持单位:

[1] 光谱学单位—波数(cm^{-1})

[2] 波的频率单位—赫兹(Hz)

例: -1000.0 cm^{-1} 输入: -1000.0 1

v=-1000 1 #输入过渡态虚频-1000 cm^{-1}

=====

*请输入生成过渡态的势垒 ΔU (可选) *

*缺省生成过渡态的势垒数据请输入 -1 -1 * #注意看这里

注意, 缺省生成过渡态的势垒将自动缺省放热方向校正系数, 并进行近似的Skodje-Truhlar
 $\Delta U = U(T=0 \text{ K}, \text{过渡态}) - \Sigma U(T=0 \text{ K}, \text{反应物})$

能量数值与单位之间用一个空格隔开, 单位用标号表示

支持单位：

[1] kJ/mol

[2] kcal/mol

[3] eV/粒子

[4] Hartree/粒子

例：30.0 kJ/mol输入：30.0 1

$\Delta U = -1 -1$ #缺省生成过渡态的势垒数据

#当缺省生成过渡态的势垒数据时将自动使用近似的Skodje-Truhlar方法。

=====

=====

计算量子隧穿效应透射系数 κ 输入信息

温度 $T=300$ K

虚频 $\nu=-1000$ cm⁻¹

生成过渡态的势垒 $\Delta U=\text{nan}$

放热方向校正系数 $V=\text{nan}$

=====

输出结果见3.1.2。

2.1.3. 完整的Skodje-Truhlar方法

输入参数表：温度、虚频、生成过渡态的势垒、放热方向校正系数

温度为反应时的温度。

支持单位：K, °C, °F

虚频为过渡态的负(虚)频率，通常写成负值。

支持单位：cm⁻¹, Hz

生成过渡态的势垒为反应过渡态和反应物在 $T = 0$ K时的内能差，即：

$$\Delta U = U(T = 0 \text{ K}, \text{TS}) - \sum_{\text{R}} U(T = 0 \text{ K}, \text{R})$$

此处 U 是包含零点能的内能，TS为过渡态，R为反应物。

支持单位：kJ/mol, kcal/mol, eV/粒子, Hartree/粒子

放热方向校正系数当反应为放热反应时为0，当反应为吸热反应时为产物和反应物在 $T = 0$ K时的内能差，即：

$$\Delta_r U = \sum_{\text{P}} U(T = 0 \text{ K}, \text{P}) - \sum_{\text{R}} U(T = 0 \text{ K}, \text{R})$$

当 $\Delta_r U < 0$ 时：

$$V = 0$$

当 $\Delta_r U > 0$ 时:

$$V = \Delta_r U$$

此处 U 是包含零点能的内能, P为产物, R为反应物。

支持单位: kJ/mol, kcal/mol, eV/粒子, Hartree/粒子

输入实例:

反应温度 $T = 300$ K, 过渡态虚频 $\nu = -1000$ cm⁻¹, 生成过渡态的势垒 $\Delta U = 30$ kJ/mol, 放热反应

使用完整的Skodje-Truhlar方法计算量子隧道效应透射系数。

```
=====
                QTST v1.4 量子过渡态动力学计算包
                Qiaosong Lin
                Wuhan University, 2019
若使用了本软件, 请引用:
Q. Lin, QTST v1.4, https://github.com/Linqiaosong/QTST
=====

*请选择功能*
[1] 计算量子隧穿效应透射系数
[2] 计算单分子反应速率常数
[3] 计算双分子反应速率常数
1 #选择计算量子隧穿效应透射系数
=====

*请选择计算方法*
[1] Wigner方法
[2] Skodje-Truhlar方法
[3] 全部计算
2 #选择使用Skodje-Truhlar方法
=====

*请输入信息*
科学计数法均按如下表示:
    2.5*10^-1表示为: 2.5e-1
=====

*请输入温度T*
温度数值与单位之间用一个空格隔开, 单位用标号表示
支持单位:
[1] 热力学温度(K)
[2] 摄氏度(C)
[3] 华氏度(F)
例: 300.0 K输入: 300.0 1
T=300 1 #输入温度300 K
```


=====

*请输入虚频 ν *

虚频数值与单位之间用一个空格隔开，带负号，单位用标号表示
支持单位：

[1] 光谱学单位—波数(cm^{-1})

[2] 波的频率单位—赫兹(Hz)

例: -1000.0 cm^{-1} 输入: -1000.0 1

ν =-1000 1 #输入过渡态虚频-1000 cm^{-1}

=====

*请输入生成过渡态的势垒 ΔU (可选) *

*缺省生成过渡态的势垒数据请输入 -1 -1 *

注意，缺省生成过渡态的势垒将自动缺省放热方向校正系数，并进行近似的Skodje-Truhlar
 $\Delta U = U(T=0 \text{ K}, \text{过渡态}) - \Sigma U(T=0 \text{ K}, \text{反应物})$

能量数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示

支持单位：

[1] kJ/mol

[2] kcal/mol

[3] eV/粒子

[4] Hartree/粒子

例: 30.0 kJ/mol输入: 30.0 1

ΔU =30 1 #输入生成过渡态的势垒30 kJ/mol

#输入生成过渡态的势垒将自动使用完整的Skodje-Truhlar方法计算

=====

*请输入放热方向校正系数 V *

正反应为放热反应时请输入0 1 #请注意此处

正反应为吸热反应时， $V = \Sigma U(T=0 \text{ K}, \text{产物}) - \Sigma U(T=0 \text{ K}, \text{反应物})$

能量数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示

支持单位：

[1] kJ/mol

[2] kcal/mol

[3] eV/粒子

[4] Hartree/粒子

例: 30.0 kJ/mol输入: 30.0 1

V =0 1 #放热反应，输入放热方向校正系数为0

=====

=====

计算量子隧穿效应透射系数 κ 输入信息

温度 $T=300 \text{ K}$

虚频 $\nu=-1000 \text{ cm}^{-1}$

生成过渡态的势垒 $\Delta U=30 \text{ kJ/mol}$

放热方向校正系数 $V=0 \text{ kJ/mol}$

=====

输出结果见3.1.3。

2.1.4. 全部计算

全部计算将同时使用Wigner方法和Skodje-Truhlar方法进行计算。

当缺省生成过渡态的能垒和放热方向校正系数时，Skodje-Truhlar方法将使用近似的Skodje-Truhlar方法。

当输入生成过渡态的能垒和放热方向校正系数时，Skodje-Truhlar方法将使用完整的Skodje-Truhlar方法。

2.2. 单分子反应速率常数

2.2.1. 自由能方法

输入参数列表：温度、转动对称数、量子隧道效应透射系数、生成过渡态的Gibbs自由能

温度为反应时的温度。

支持单位：K, °C, °F

转动对称数

!!! 当自由能经过转动对称简并校正时，转动对称数请设为1。

!!! 大部分量子化学计算软件在正确判断了分子点群的时候，都会进行自由能的转动对称简并校正，因此大部分时候转动对称数均为1。

输入转动对称数的原因时为了计算反应路径简并度，反应路径简并度为：

$$\sigma = \frac{\prod_{\text{R}} N(\text{R})}{N(\text{TS})}$$

其中R为反应物，TS为过渡态， N 为转动对称数。

QTST v1.3版本以后输入过渡态和反应物的转动对称数会自动计算反应路径简并度。

转动对称数与分子点群有关，具体关系如下表：

分子点群	转动对称数
$C_1, C_i, C_s, C_{\infty v}$	1
C_n, C_{nv}, C_{nh}	n
S_n	$n/2$
D_n, D_{nd}, D_{nh}	$2n$
$D_{\infty h}$	2
T, T_d	12
O_h	24
I_h	60

量子隧道效应透射系数计算方法参考2.1。

忽略量子隧道效应的时候透射系数请设为1。

生成过渡态的Gibbs自由能为标准压力下，反应温度下过渡态与反应物的Gibbs自由能之差。

$$\Delta G = G(p^\theta, T, \text{TS}) - \sum_{\text{R}} G(p^\theta, T, \text{R})$$

此处 G 是包含零点能的Gibbs自由能，TS为过渡态，R为反应物， T 为反应温度， $p^\theta = 1 \text{ bar} = 1 \times 10^5 \text{ Pa}$ 为标准压力。

支持单位：kJ/mol, kcal/mol, eV/粒子, Hartree/粒子

输入实例：

单分子反应，温度 $T = 298 \text{ K}$ ，生成过渡态的Gibbs自由能 $\Delta G = 23 \text{ kJ/mol}$ ，自由能经过转动对称简并校正，不考虑量子隧穿效应

用自由能方法计算速率常数。

```
=====
                        QTST v1.4 量子过渡态动力学计算包
                        Qiaosong Lin
                        Wuhan University, 2019
若使用了本软件，请引用：
Q. Lin, QTST v1.4, https://github.com/Linqiaosong/QTST
=====

*请选择功能*
[1] 计算量子隧穿效应透射系数
[2] 计算单分子反应速率常数
[3] 计算双分子反应速率常数
2 #选择计算单分子反应速率常数
=====

*请选择计算方法*
[1] Gibbs自由能方法
[2] 配分函数方法
[3] 全部计算
1 #选择使用Gibbs自由能方法
=====

*请输入信息*
科学计数法均按如下表示：
    2.5*10^-1表示为：2.5e-1
=====

*请输入温度T*
```

温度数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示
支持单位：

[1] 热力学温度(K)

[2] 摄氏度(C)

[3] 华氏度(F)

例：300.0 K 输入：300.0 1

T=298 1 #输入温度298 K

=====

请输入转动对称数N

如果计算自由能或配分函数时已经进行了转动对称简并校正，请填1 #注意看此

N(过渡态)=1 #已经进行了转动对称简并校正，填1

N(反应物A)=1 #已经进行了转动对称简并校正，填1

反应路径简并数 σ =N(反应物A)/N(过渡态)=1 #自动计算得出，不需要输入

=====

*请输入量子隧穿效应透射系数 κ *

若忽略量子隧穿效应，请输入1

κ =1 #忽略量子隧穿效应，填1

=====

请输入生成过渡态的Gibbs自由能 ΔG^

$\Delta G = G(p=1 \text{ bar}, T, \text{过渡态}) - G(p=1 \text{ bar}, T, \text{反应物A})$

能量数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示

支持单位：

[1] kJ/mol

[2] kcal/mol

[3] eV/粒子

[4] Hartree/粒子

例：30.0 kJ/mol 输入：30.0 1

ΔG =23 1 #输入生成过渡态的Gibbs自由能23 kJ/mol

=====

计算单分子反应速率常数输入信息

温度T=298 K

反应路径简并数 σ =1

量子隧穿效应透射系数 κ =1

生成过渡态的Gibbs自由能 ΔG =23 kJ/mol

生成过渡态的能垒 ΔU =nan

过渡态的配分函数 $Q(V=0, TS)$ =nan

反应物A的配分函数 $Q(V=0, A)$ =nan

=====

输出结果见3.2.1。

2.2.2. 配分函数方法

输入参数列表：温度、转动对称数、量子隧道效应透射系数、生成过渡态的势垒，配分函数

温度为反应时的温度。

支持单位：K, °C, °F

转动对称数

!!! 当转动配分函数经过转动对称简并校正时，转动对称数请设为1。

!!! 大部分量子化学计算软件在正确判断了分子点群的时候，都会进行转动配分函数的转动对称简并校正，因此大部分时候转动对称数均为1。

输入转动对称数的原因时为了计算反应路径简并度，反应路径简并度为：

$$\sigma = \frac{\prod_{\text{R}} N(\text{R})}{N(\text{TS})}$$

其中R为反应物，TS为过渡态， N 为转动对称数。

QTST v1.3版本以后输入过渡态和反应物的转动对称数会自动计算反应路径简并度。

转动对称数与分子点群有关，具体关系如下表：

分子点群	转动对称数
$C_1, C_i, C_s, C_{\infty v}$	1
C_n, C_{nv}, C_{nh}	n
S_n	$n/2$
D_n, D_{nd}, D_{nh}	$2n$
$D_{\infty h}$	2
T, T_d	12
O_h	24
I_h	60

量子隧道效应透射系数计算方法参考[2.1](#)。

忽略量子隧道效应的时候透射系数请设为1。

生成过渡态的势垒为反应过渡态和反应物在 $T = 0 \text{ K}$ 时的内能差，即：

$$\Delta U = U(T = 0 \text{ K}, \text{TS}) - \sum_{\text{R}} U(T = 0 \text{ K}, \text{R})$$

此处 U 是包含零点能的内能，TS为过渡态，R为反应物。

支持单位：kJ/mol, kcal/mol, eV/粒子, Hartree/粒子

需要输入过渡态的配分函数和反应物的配分函数。

输入实例：

单分子反应，温度 $T = 298\text{ K}$ ，生成过渡态的能垒 $\Delta U = 88.613\text{ kJ/mol}$ ，过渡态的配分函数 $Q_{\text{TS}} = 3.76 \times 10^{12}$ ，反应物的配分函数 $Q_{\text{A}} = 7.30 \times 10^{12}$ ，转动配分函数均经过转动对称简并校正，不考虑量子隧穿效应

用配分函数方法计算速率常数。

```
=====
QTST v1.4 量子过渡态动力学计算包
Qiaosong Lin
Wuhan University, 2019
若使用了本软件，请引用：
Q. Lin, QTST v1.4, https://github.com/Linqiaosong/QTST
=====

*请选择功能*
[1] 计算量子隧穿效应透射系数
[2] 计算单分子反应速率常数
[3] 计算双分子反应速率常数
2 #选择计算单分子反应速率常数
=====

*请选择计算方法*
[1] Gibbs自由能方法
[2] 配分函数方法
[3] 全部计算
2 #选择使用配分函数方法
=====

*请输入信息*
科学计数法均按如下表示：
2.5*10^-1表示为：2.5e-1 #注意此处
=====

*请输入温度T*
温度数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示
支持单位：
[1] 热力学温度(K)
[2] 摄氏度(C)
[3] 华氏度(F)
例：300.0 K输入：300.0 1
T=298 1 #输入温度298 K
=====

*请输入转动对称数N*
*如果计算自由能或配分函数时已经进行了转动对称简并校正，请填1* #注意此处
N(过渡态)=1 #已经进行了转动对称简并校正，填1
N(反应物A)=1 #已经进行了转动对称简并校正，填1
反应路径简并数 $\sigma = N(\text{反应物A}) / N(\text{过渡态}) = 1$  #自动计算得出，不需要输入
=====

*请输入量子隧穿效应透射系数 $\kappa$ *
*若忽略量子隧穿效应，请输入1*
 $\kappa = 1$  #忽略量子隧穿效应，填1
```

```

=====
*请输入生成过渡态的能垒 $\Delta U^*$ 
 $\Delta U = U(T=0\text{ K, 过渡态}) - U(T=0\text{ K, 反应物A})$ 

能量数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示
支持单位：
[1] kJ/mol
[2] kcal/mol
[3] eV/粒子
[4] Hartree/粒子
例：30.0 kJ/mol 输入：30.0 1
 $\Delta U = 88.613\text{ 1}$  #输入生成过渡态的能垒88.613 kJ/mol
=====

*请输入配分函数Q*
配分函数不含零点能ZPE成分，即 $Q(V=0)$ 
 $Q(V=0, \text{过渡态}) = 3.76e12$  #输入过渡态的配分函数3.76e12
 $Q(V=0, \text{反应物A}) = 7.30e12$  #输入反应物A的配分函数7.30e12
=====

*计算单分子反应速率常数输入信息*
温度 $T = 298\text{ K}$ 
反应路径简并数 $\sigma = 1$ 
量子隧穿效应透射系数 $\kappa = 1$ 
生成过渡态的Gibbs自由能 $\Delta G = \text{nan}$ 
生成过渡态的能垒 $\Delta U = 88.613\text{ kJ/mol}$ 
过渡态的配分函数 $Q(V=0, TS) = 3.76e+012$ 
反应物A的配分函数 $Q(V=0, A) = 7.3e+012$ 
=====

```

输出结果见[3.2.2](#)。

2.2.3. 全部计算

全部计算将同时使用[Gibbs自由能方法](#)和[配分函数方法](#)计算。

2.3. 双分子反应速率常数

2.3.1. 自由能方法

输入参数列表：温度、转动对称数、量子隧道效应透射系数、生成过渡态的Gibbs自由能

温度为反应时的温度。

支持单位：K, °C, °F

转动对称数

!!! 当自由能经过转动对称简并校正时，转动对称数请设为1。

!!! 大部分量子化学计算软件在正确判断了分子点群的时候，都会进行自由能的转动对称简并校正，因此大部分时候转动对称数均为1。

输入转动对称数的原因时为了计算反应路径简并度，反应路径简并度为：

$$\sigma = \frac{\prod_{\text{R}} N(\text{R})}{N(\text{TS})}$$

其中R为反应物，TS为过渡态， N 为转动对称数。

QTST v1.3版本以后输入过渡态和反应物的转动对称数会自动计算反应路径简并度。

转动对称数与分子点群有关，具体关系如下表：

分子点群	转动对称数
$C_1, C_i, C_s, C_{\infty v}$	1
C_n, C_{nv}, C_{nh}	n
S_n	$n/2$
D_n, D_{nd}, D_{nh}	$2n$
$D_{\infty h}$	2
T, T_d	12
O_h	24
I_h	60

量子隧道效应透射系数计算方法参考2.1。

忽略量子隧道效应的时候透射系数请设为1。

生成过渡态的Gibbs自由能为标准压力下，反应温度下过渡态与反应物的Gibbs自由能之差。

$$\Delta G = G(p^\theta, T, \text{TS}) - \sum_{\text{R}} G(p^\theta, T, \text{R})$$

此处 G 是包含零点能的Gibbs自由能，TS为过渡态，R为反应物， T 为反应温度， $p^\theta = 1 \text{ bar} = 1 \times 10^5 \text{ Pa}$ 为标准压力。

支持单位：kJ/mol, kcal/mol, eV/粒子, Hartree/粒子

输入实例：

双分子反应，压力 $p = 1 \text{ bar}$ ，温度 $T = 298 \text{ K}$ ，生成过渡态的Gibbs自由能 $\Delta G = 80.92 \text{ kJ/mol}$ ，自由能经过转动对称简并校正，不考虑量子隧穿效应

通过自由能方法计算速率常数。

=====

QTST v1.4 量子过渡态动力学计算包

Qiaosong Lin

Wuhan University, 2019

若使用了本软件, 请引用:

Q. Lin, QTST v1.4, <https://github.com/Linqiaosong/QTST>

=====

=====

请选择功能

- [1] 计算量子隧穿效应透射系数
 - [2] 计算单分子反应速率常数
 - [3] 计算双分子反应速率常数
 - 3 #选择计算双分子反应速率常数
- =====

=====

请选择计算方法

- [1] Gibbs自由能方法
 - [2] 配分函数方法
 - [3] 全部计算
 - 1 #选择Gibbs自由能方法
- =====

=====

请输入温度T

温度数值与单位之间用一个空格隔开, 单位用标号表示

支持单位:

- [1] 热力学温度(K)
- [2] 摄氏度(C)
- [3] 华氏度(F)

例: 300.0 K 输入: 300.0 1

T=298 1 #输入温度 298 K

=====

请输入转动对称数N

如果计算自由能或配分函数时已经进行了转动对称简并校正, 请填1 #注意此处

N(过渡态)=1 #进行了转动对称简并校正, 填1

N(反应物A)=1 #进行了转动对称简并校正, 填1

N(反应物B)=1 #进行了转动对称简并校正, 填1

反应路径简并数 $\sigma = N(\text{反应物A}) * N(\text{反应物B}) / N(\text{过渡态}) = 1$ #自动计算, 不需要填写

=====

*请输入量子隧穿效应透射系数 κ *

若忽略量子隧穿效应, 请输入1

$\kappa = 1$ #忽略量子隧穿效应, 填1

=====

请输入生成过渡态的Gibbs自由能 ΔG^

$\Delta G = G(p=1 \text{ bar}, T, \text{过渡态}) - [G(p=1 \text{ bar}, T, \text{反应物A}) + G(p=1 \text{ bar}, T, \text{反应物B})]$

能量数值与单位之间用一个空格隔开, 单位用标号表示

支持单位:

- [1] kJ/mol
- [2] kcal/mol
- [3] eV/粒子

[4] Hartree/粒子
 例: 30.0 kJ/mol输入: 30.0 1
 ΔG=80.92 1 #输入生成过渡态的Gibbs自由能80.92 kJ/mol
 =====
 计算双分子反应速率常数输入信息
 参考态压强p0=1 bar
 温度T=298 K
 反应路径简并数σ=1
 量子隧穿效应透射系数κ=1
 生成过渡态的Gibbs自由能ΔG=80.92 kJ/mol
 生成过渡态的能垒ΔU=nan
 过渡态的配分函数Q(V=0, TS)=nan
 反应物A的配分函数Q(V=0, A)=nan
 反应物B的配分函数Q(V=0, B)=nan
 =====

输出结果见3.3.1。

2.3.2. 配分函数方法

输入参数列表: 温度、转动对称数、量子隧道效应透射系数、生成过渡态的势垒, 配分函数

温度为反应时的温度。

支持单位: K, °C, °F

转动对称数

!!! 当转动配分函数经过转动对称简并校正时, 转动对称数请设为1。

!!! 大部分量子化学计算软件在正确判断了分子点群的时候, 都会进行转动配分函数的转动对称简并校正, 因此大部分时候转动对称数均为1。

输入转动对称数的原因时为了计算反应路径简并度, 反应路径简并度为:

$$\sigma = \frac{\prod_R N(R)}{N(TS)}$$

其中R为反应物, TS为过渡态, N为转动对称数。

QTST v1.3版本以后输入过渡态和反应物的转动对称数会自动计算反应路径简并度。

转动对称数与分子点群有关, 具体关系如下表:

分子点群	转动对称数
C ₁ , C _i , C _s , C _{∞v}	1
C _n , C _{nv} , C _{nh}	n
S _n	n/2

分子点群	转动对称数
D_n, D_{nd}, D_{nh}	$2n$
$D_{\infty h}$	2
T, T_d	12
O_h	24
I_h	60

量子隧道效应透射系数计算方法参考2.1。

忽略量子隧道效应的时候透射系数请设为1。

生成过渡态的势垒为反应过渡态和反应物在 $T = 0$ K时的内能差，即：

$$\Delta U = U(T = 0 \text{ K}, \text{TS}) - \sum_{\text{R}} U(T = 0 \text{ K}, \text{R})$$

此处 U 是包含零点能的内能，TS为过渡态，R为反应物。

支持单位：kJ/mol, kcal/mol, eV/粒子, Hartree/粒子

需要输入过渡态的配分函数和反应物的配分函数。

输入实例：

双分子反应，温度 $T = 298$ K，生成过渡态的势垒 $\Delta U = 57.95$ kJ/mol，过渡态配分函数 $Q_{\text{TS}} = 8.48 \times 10^9$ ，反应物A配分函数 $Q_{\text{A}} = 1.12 \times 10^9$ ，反应物B配分函数 $Q_{\text{B}} = 8.05 \times 10^4$ ，转动配分函数均经过转动对称简并校正，不考虑量子隧穿效应。

用配分函数方法计算速率常数。

```
=====
QTST v1.4 量子过渡态动力学计算包
      Qiaosong Lin
      Wuhan University, 2019
若使用了本软件，请引用：
Q. Lin, QTST v1.4, https://github.com/Linqiaosong/QTST
=====

=====
      *请选择功能*
[1] 计算量子隧穿效应透射系数
[2] 计算单分子反应速率常数
[3] 计算双分子反应速率常数
3 #选择计算双分子反应速率常数
=====
```

=====

请选择计算方法

- [1] Gibbs自由能方法
- [2] 配分函数方法
- [3] 全部计算
- 2 #选择配分函数方法

=====

=====

请输入温度T

温度数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示
支持单位：

- [1] 热力学温度(K)
- [2] 摄氏度(C)
- [3] 华氏度(F)

例：300.0 K输入：300.0 1

T=298 1 #输入温度298 K

=====

请输入转动对称数N

如果计算自由能或配分函数时已经进行了转动对称简并校正，请填写1 #注意此处

N(过渡态)=1 #已经进行了转动对称简并校正，填1

N(反应物A)=1 #已经进行了转动对称简并校正，填1

N(反应物B)=1 #已经进行了转动对称简并校正，填1

反应路径简并数 σ =N(反应物A)*N(反应物B)/N(过渡态)=1 #自动计算得出，不需要填写

=====

*请输入量子隧穿效应透射系数 κ *

若忽略量子隧穿效应，请输入1

κ =1 #忽略量子隧道效应，填1

=====

*请输入生成过渡态的能垒 ΔU *

$\Delta U=U(T=0\text{ K}, \text{过渡态}) - [U(T=0\text{ K}, \text{反应物A}) + U(T=0\text{ K}, \text{反应物B})]$

能量数值与单位之间用一个空格隔开，单位用标号表示
支持单位：

- [1] kJ/mol
- [2] kcal/mol
- [3] eV/粒子
- [4] Hartree/粒子

例：30.0 kJ/mol输入：30.0 1

$\Delta U=57.95\ 1$ #输入生成过渡态的能垒57.95 1

=====

请输入配分函数Q

配分函数不含零点能ZPE成分，即 $Q(V=0)$

$Q(V=0, \text{过渡态})=8.48e9$ #输入过渡态的配分函数8.48e9

$Q(V=0, \text{反应物A})=1.12e9$ #输入反应物A的配分函数1.12e9

$Q(V=0, \text{反应物B})=8.05e4$ #输入反应物B的配分函数8.05e4

=====

计算双分子反应速率常数输入信息

参考态压强 $p_0=1\text{ bar}$

温度 $T=298\text{ K}$

反应路径简并数 $\sigma=1$

量子隧穿效应透射系数 $\kappa=1$

生成过渡态的Gibbs自由能 $\Delta G=\text{nan}$

生成过渡态的能垒 $\Delta U=57.95\text{ kJ/mol}$

过渡态的配分函数 $Q(V=0, TS)=8.48e+009$
反应物A的配分函数 $Q(V=0, A)=1.12e+009$
反应物B的配分函数 $Q(V=0, B)=80500$

=====

输出结果见[3.3.2](#)。

2.3.3. 全部计算

全部计算将同时使用[Gibbs自由能方法](#)和[配分函数方法](#)计算。

3. 计算输出

3.1. 量子隧道效应透射系数

3.1.1. Wigner方法

输出实例：

[2.1.1](#)的输出内容。

=====

计算量子隧穿效应透射系数结果

透射系数通过Wigner方法计算

注意：Wigner方法计算精度较低，在非高温情况下通常会造成重大误差

=====

透射系数 $\kappa=1.9597$

=====

计算得到用Wigner方法计算量子隧穿效应透射系数：

$$\kappa = 1.9597$$

3.1.2. 近似的Skodje-Truhlar方法

输出示例：

[2.1.2](#)的输出内容。

=====

计算量子隧穿效应透射系数结果

透射系数通过Skodje-Truhlar方法计算

=====

$\alpha=3.16084e+020 \text{ J}^{-1}$

$\beta=2.41432e+020 \text{ J}^{-1}$

透射系数 $\kappa=3.55108$

=====

计算得到用近似的Skodje-Truhlar方法计算量子隧穿效应透射系数:

$$\kappa = 3.55108$$

以及对应的与虚频有关的参数:

$$\alpha = \frac{2\pi}{h\nu} = 3.16084 \times 10^{20} \text{ J}^{-1}$$

和与温度有关的参数:

$$\beta = 1/k_B T = 2.41432 \times 10^{20} \text{ J}^{-1}$$

!!! 此方法只适用于 $\alpha > \beta$ 的情况, 当 $\alpha < \beta$ 时会弹出如下巨大的错误提示框, 此时的结果可能造成重大错误, 建议补充隧穿能垒和放热方向校正系数后进行完整的Skodje-Truhlar方法计算。

```
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
!!
!!      未提供生成过渡态的势垒ΔU和放热方向校正系数V的数值, 通过近似的Skodje-Tru
!!
!!      Alpha<Beta, 可能造成重大错误                                !!
!!
!!      建议补充生成过渡态的势垒ΔU和放热方向校正系数V的数值, 进行完整的Skodje-T
!!
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
```

3.1.3. 完整的Skodje-Truhlar方法

输出示例:

2.1.3的输出内容。

```
=====
                        *计算量子隧穿效应透射系数结果*
                        *透射系数通过Skodje-Truhlar方法计算*
=====
α=3.16084e+020 J-1
β=2.41432e+020 J-1
透射系数κ=3.47261
=====
```

计算得到用完整的Skodje-Truhlar方法计算量子隧穿效应透射系数:

$$\kappa = 3.47261$$

以及对应的与虚频有关的参数:

$$\alpha = \frac{2\pi}{h\nu} = 3.16084 \times 10^{20} \text{ J}^{-1}$$

和与温度有关的参数：

$$\beta = 1/k_B T = 2.41432 \times 10^{20} \text{ J}^{-1}$$

3.1.4. 全部计算

全部计算将同时输出使用[Wigner方法](#)和Skodje-Truhlar方法进行计算的计算结果。

当缺省生成过渡态的能垒和放热方向校正系数时，Skodje-Truhlar方法输出使用[近似的Skodje-Truhlar方法](#)的计算结果。

当输入生成过渡态的能垒和放热方向校正系数时，Skodje-Truhlar方法将输出使用[完整的Skodje-Truhlar方法](#)计算结果。

3.2. 单分子反应速率常数

3.2.1. 自由能方法

输出示例：

[2.2.1](#)的输出结果。

```
=====
                        *计算单分子反应速率常数结果*
                        *速率常数通过自由能计算*
=====
反应机理：A->TS->P
速率常数k(TST)=5.77557e+008 s-1
反应物A半衰期τ=1.20014e-009 s
量子隧穿效应贡献率η=0
反应动力学方程：r(TST)/s-1=5.77557e+008*[A]
=====
```

计算得到单分子反应



速率常数为：

$$k_{\text{TST}} = 5.77557 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$$

反应物A的半衰期为：

$$\tau = 1.20014 \times 10^{-9} \text{ s}$$

量子隧穿效应贡献率为：

$$\eta = 0$$

一级反应动力学方程为：

$$r_{\text{TST}}/\text{s}^{-1} = 5.77557 \times 10^8 \times [\text{A}]$$

3.2.2. 配分函数方法

输出示例：

2.2.2的输出结果内容。

```
=====
                        *计算单分子反应速率常数结果*
                        *速率常数通过配分函数计算*
=====
反应机理：A->TS->P
速率常数k(TST)=0.00093926 s-1
反应物A半衰期τ=737.971 s
量子隧穿效应贡献率η=0
反应动力学方程：r(TST)/s-1=0.00093926*[A]
=====
```

计算得到单分子反应



速率常数为：

$$k_{\text{TST}} = 9.3926 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$$

反应物A的半衰期为：

$$\tau = 737.971 \text{ s}$$

量子隧穿效应贡献率为：

$$\eta = 0$$

一级反应动力学方程为：

$$r_{\text{TST}}/\text{s}^{-1} = 9.3926 \times 10^{-4} \times [\text{A}]$$

3.2.3. 全部计算

全部计算将同时输出使用Gibbs自由能方法和配分函数方法计算的结果，以及他们结果的平均值。

!!! 注意：平均值的结果仅供参考，当Gibbs自由能方法和配分函数方法差异太大时，平均值的结果不可靠

3.3. 双分子反应速率常数

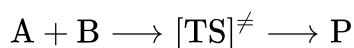
3.3.1. 自由能方法

输出示例：

2.3.1的输出结果内容。

```
=====
                        *计算双分子反应速率常数结果*
                        *速率常数通过Gibbs自由能计算*
=====
反应机理：A+B->TS->P
速率常数k(TST)=1.00787 s-1*(mol/L)-1
量子隧穿效应贡献率η=0
反应动力学方程：r(TST)/s-1*(mol/L)-1=1.00787*[A]*[B]
=====
```

计算得到双分子反应



速率常数为：

$$k_{\text{TST}} = 1.00787 \text{ s}^{-1} \cdot (\text{mol} \cdot \text{L}^{-1})^{-1}$$

量子隧穿效应贡献率为：

$$\eta = 0$$

二级反应动力学方程为：

$$r_{\text{TST}}/\text{s}^{-1} \cdot (\text{mol} \cdot \text{L}^{-1})^{-1} = 1.00787 \times [A] \cdot [B]$$

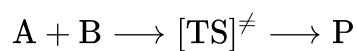
3.3.2. 配分函数方法

输出示例：

2.3.2的输出结果内容。

```
=====
                        *计算双分子反应速率常数结果*
                        *速率常数通过配分函数计算*
=====
反应机理：A+B->TS->P
速率常数k(TST)=1.00688 s-1*(mol/L)-1
量子隧穿效应贡献率η=0
反应动力学方程：r(TST)/s-1*(mol/L)-1=1.00688*[A]*[B]
=====
```

计算得到双分子反应



速率常数为:

$$k_{\text{TST}} = 1.00688 \text{ s}^{-1} \cdot (\text{mol} \cdot \text{L}^{-1})^{-1}$$

量子隧穿效应贡献率为:

$$\eta = 0$$

二级反应动力学方程为:

$$r_{\text{TST}}/\text{s}^{-1} \cdot (\text{mol} \cdot \text{L}^{-1})^{-1} = 1.00688 \times [\text{A}] \cdot [\text{B}]$$

3.3.3. 全部计算

全部计算将同时输出使用Gibbs自由能方法和配分函数方法计算的结果，以及他们结果的平均值。

!!! 注意：平均值的结果仅供参考，当Gibbs自由能方法和配分函数方法差异太大时，平均值的结果不可靠