## 模拟流程：

**Materials Studio->**画分子结构得到分子坐标(mol2文件)->data文件（python转置成data文件）->使用服务器（VNC-Viewer、putty、Winscp）

->**ReaxFFMD计算-**>编译GMD->得到结果

手机屏幕的截图

描述已自动生成

输入nohup./ 可执行文件名 -c 命名文件名 文件名.data&

图形用户界面, 文本

描述已自动生成

注：

1. Mol2文件：atom、bond（无用）
2. VNC- Viewer：可视化远程连接、putty、Winscp可用终端命令替代
3. 终端连服务器命令：ssh xiaoyy@192.168.155.245 -p 22
4. Varxmd->data\_array->liuhan->p4-new->p1

图形用户界面, 应用程序

描述已自动生成

**Specslist.txt文件：种类及其inchi**图片包含 表格

描述已自动生成

**1000JP-10-01d.anm:**

文本, 信件

描述已自动生成

文本

描述已自动生成表格

描述已自动生成