

# Materials Studio

## 多尺度多功能分子模拟软件

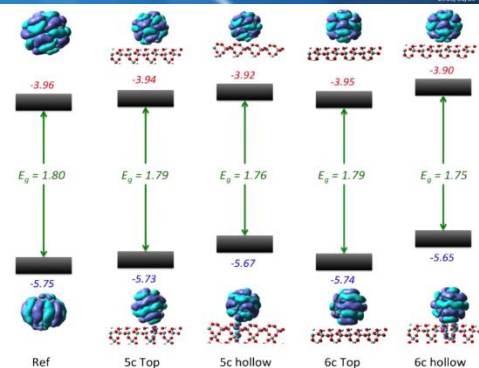
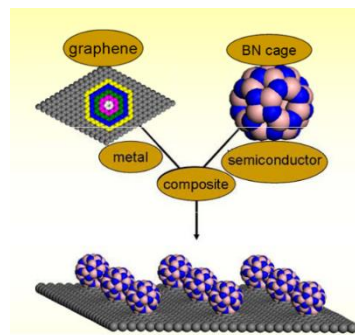
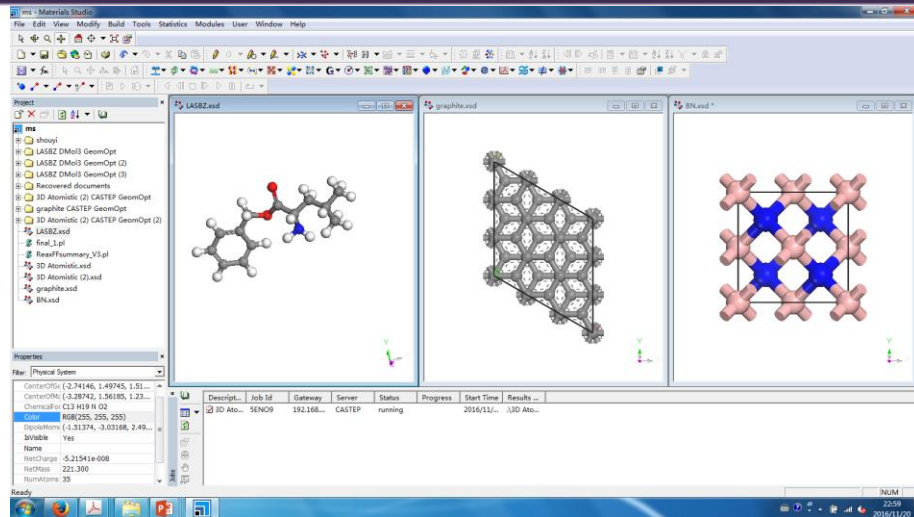
---

蒋佳丽 创腾科技技术部

2016年11月22日

# 主要内容：

- ❖ 分子模拟意义
- ❖ MS分子模拟软件
- ❖ MS在材料研究中的应用

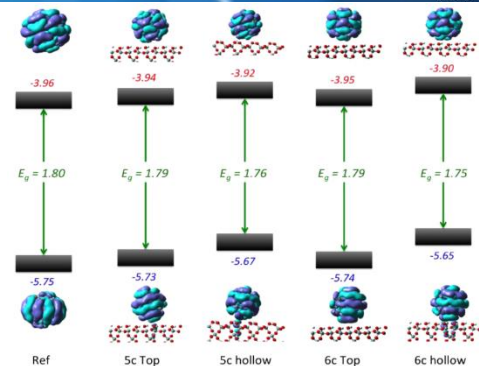
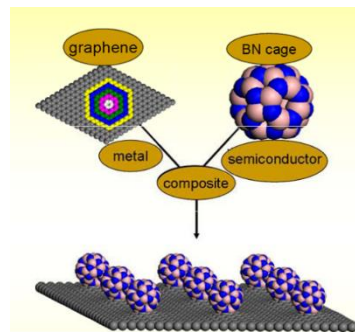
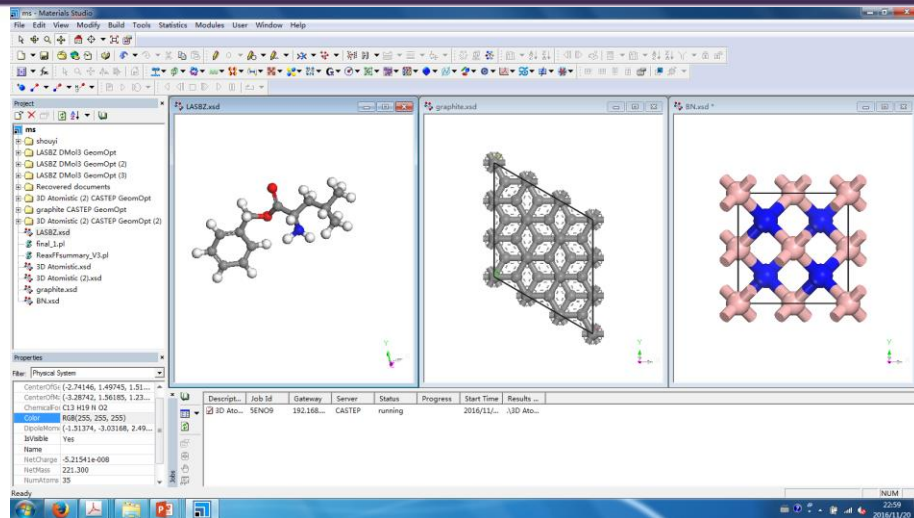


# 主要内容：

❖ 分子模拟意义

❖ MS分子模拟软件

❖ MS在材料研究中的应用



# 什么是分子模拟？

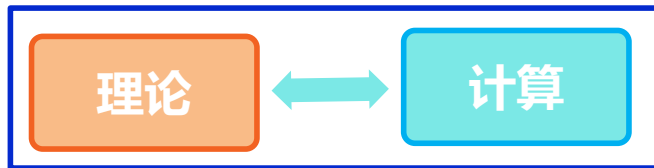
科学靠两条腿走路，一是**理论**，一是**实验**。

有时一条腿走在前面，有时另一条腿走在前面。但只有使用两条腿，才能前进。

——密立根



实验



=

分子模拟方法



# 什么是分子模拟？

诺贝尔  
奖

neotrident®  
创腾科技

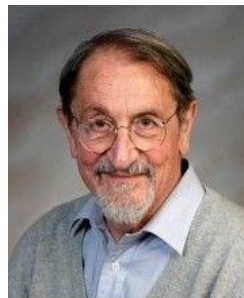
## 1998年 密度泛函理论 ( DFT )



Walter Kohn

**量子化学**已经发展成为广大化学家所使用的工具，将化学带入一个新时代，在这个新时代里实验和理论能够共同协力探讨分子体系的性质，化学不再是纯实验科学了。

## 2013年 复杂化学系统的多尺度模型



Martin Karplus



Michael Levitt



Arieh Warshel

从计算机上获得的理论结果被现实中的实验证实，之后又产生了新的线索，引导我们去探索原子世界工作的原理。在这一角度，理论和实践呈现出相辅相成、互相促进的关系。

# 为什么需要分子模拟?

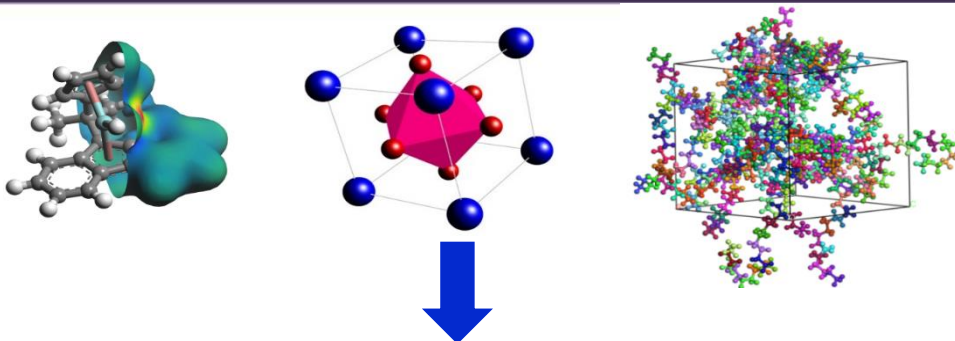
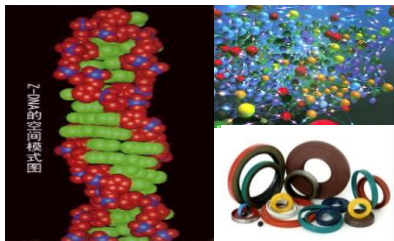
金属材料



无机非金属



高分子及复合材料



**基本物性**：**电子性质**（电荷密度、能带结构、态密度、原子轨道、电荷等），**光学性质**（吸收系数、折射率、介电常数、红外光谱、拉曼光谱、X射线吸收谱、核磁共振谱等），**力学性质**（弹性常数、体积模量、剪切模量、杨氏模量等），**磁学性质**（磁矩），**热力学性质**（熵、焓、吉布斯自由能）等。

**解释实验现象**：How, Why, Where

**预测材料性能**：new phenomenon



# 为什么需要分子模拟？

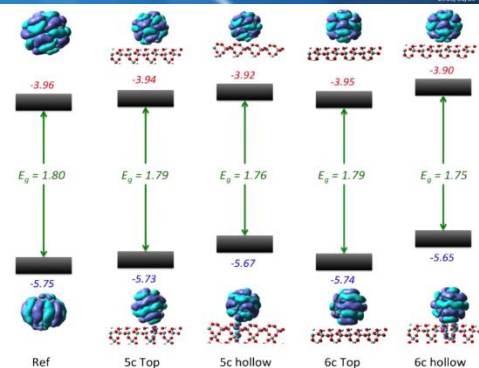
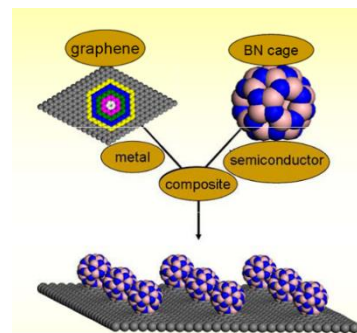
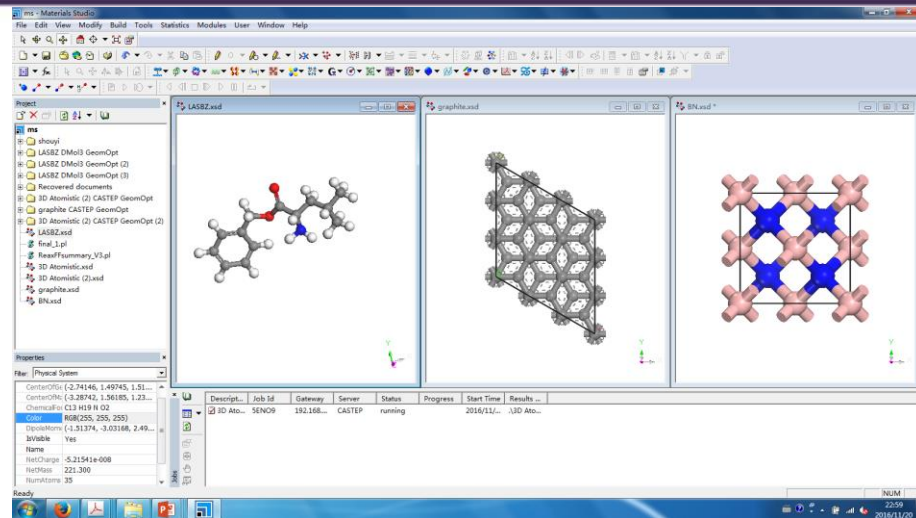
**Celanese公司**：全球特种材料和化学品生产的技术领先者，产品被广泛应用于工业和消费品领域。需要从**300**个候选物中找到新的共混材料。

- 试验周期：**1月-1年/候选物**
- 试验投入：据IDC调查，每个试验约花费500-30000美元，我们这里选取**1000美元**
- 但Celanese公司借助模拟筛选方法对候选物进行预处理，从中选出了**30**个最佳候选物进行试验，最终得到所需材料。

	试验次数	试验周期	成本(美元)
<b>传统实验</b>	300	25年	30万左右
<b>模拟筛选</b>	30	2年半	3~4万

# 主要内容：

- ❖ 分子模拟意义
- ❖ **MS**分子模拟软件
- ❖ MS在材料研究中的应用

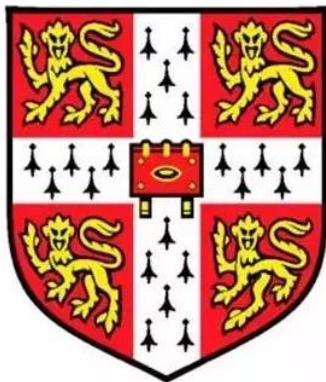




- 软件集成运营商: **Dassault Systemes BIOVIA**

世界领先的科学创新周期管理软件及解决方案供应商

在全球各地设有研发机构: San Diego, Cambridge, Tokyo, Paris, Munich, Boston...





# 谁在使用Materials Studio ?



牢固掌握核心研发技术

# 取得的高水平的科研成果



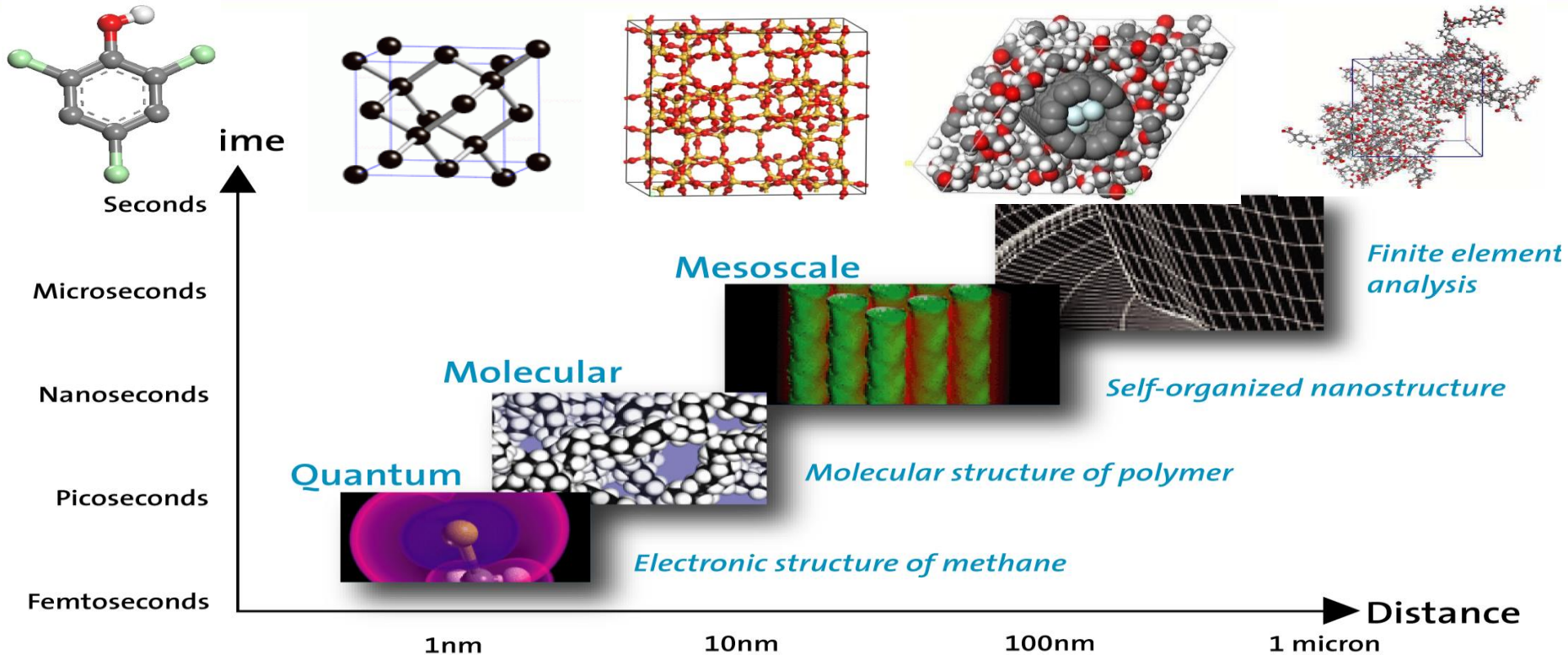
2006~2015年，全球各地研究人员使用**Materials Studio**已在顶级期刊发表论文 **16000**篇

包括 *Nature*、*Science*、*Nature Materials*、*Nature Chemistry*、*Progress in Surface Science*、*Small*、*Physical Review Letters*、*Applied Physics Letters*、*ACS Nano*、*J. Am. Chem. Soc. Proc. Nat. Acad. Sci.*、*Physical Review A*、*Physical Review B*、*J. Appl. Phys.*、*Journal of Chemical Physics*、*Chemical Physics Letters*、*Nature Nanotechnology*、*Chemical Society Reviews*、*Nanoscale Research Letters*、*Nanoscale* 等知名期刊。

查文献链接

<http://references.accelrys.com>

# Materials Studio是整合的计算模拟平台



• 多尺度，应用领域全面



# Materials Studio是整合的计算模拟平台

## 量子力学

- *Castep*
- *Dmol3*
- *Onetep*
- *Qmera*
- *VAMP*
- *DFTB+*



## 分子力学、动力学

- *Forcite plus*
- *Gulp*
- *COMPASS*
- *Amorphous Cell*
- *Sorption*



## 介观动力学

- *MesoDyn*
- *Mesocite*



*Materials Visualizer*



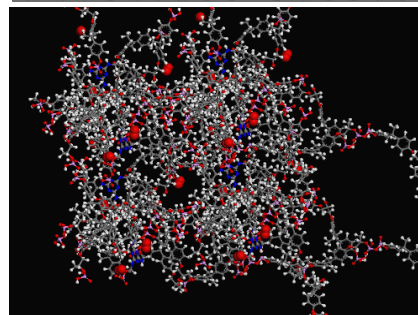
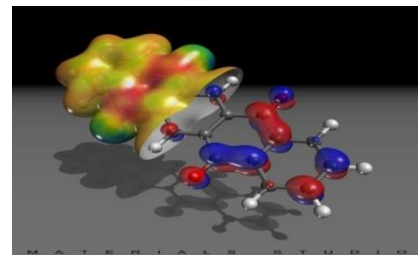
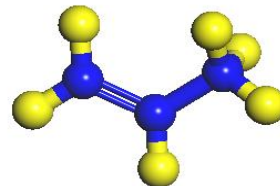
- *Reflex plus*
- *Xcell*
- *Polymorph Predictor*
- *Morpholog*

晶体学



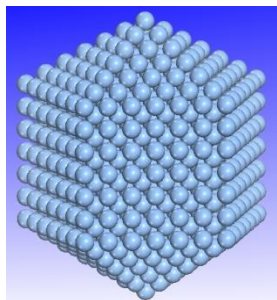
• *QSAR*

构效关系

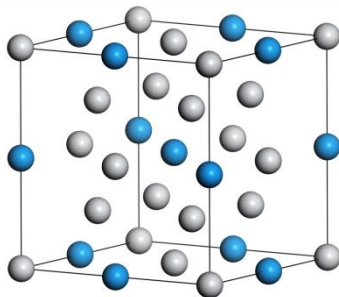


整合多达**21** 个功能模块，实现从电子结构解析到宏观性能预测的全尺度科学研究

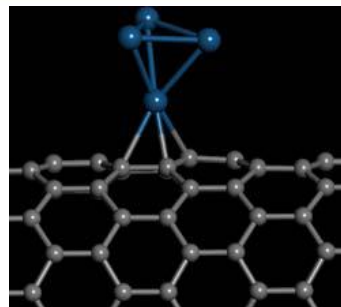




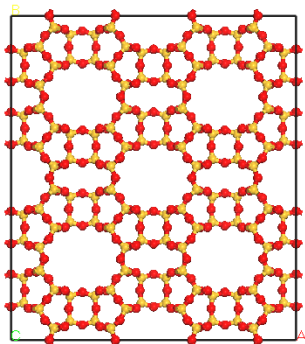
Ag团簇



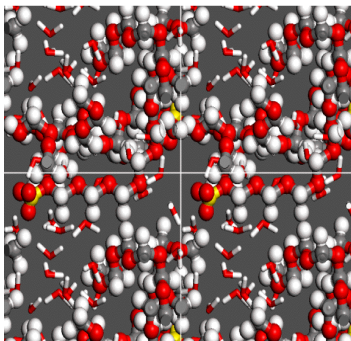
$Ti_{1-m}X_m$ 合金  
(X = V, Nb, Ta, Mo, W)



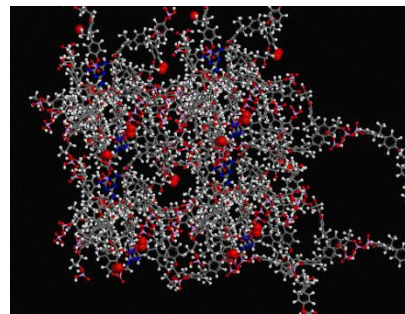
纳米复合材料



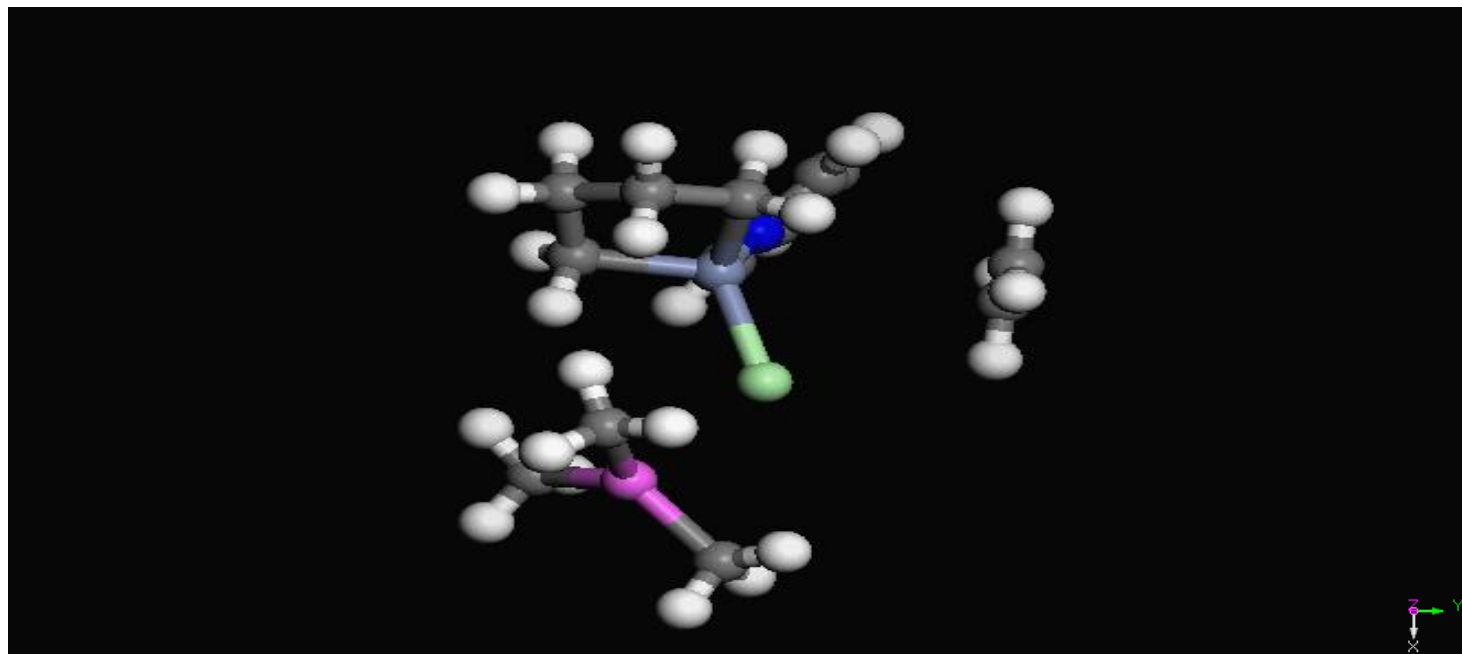
沸石分子筛结构

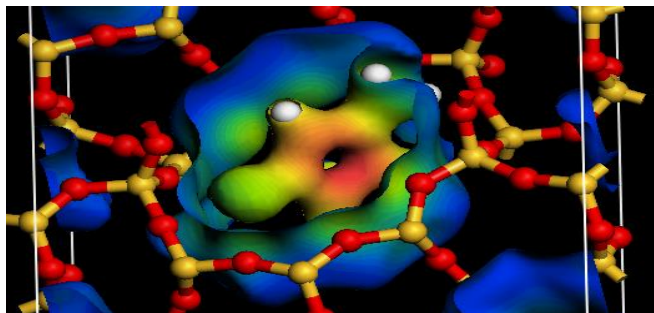


离子液体

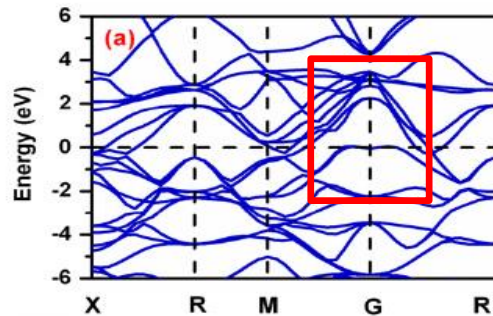
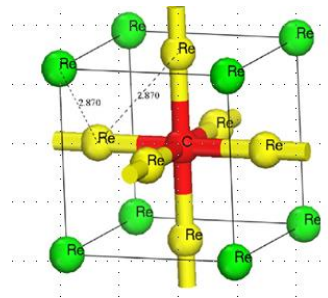


高分子膜材料

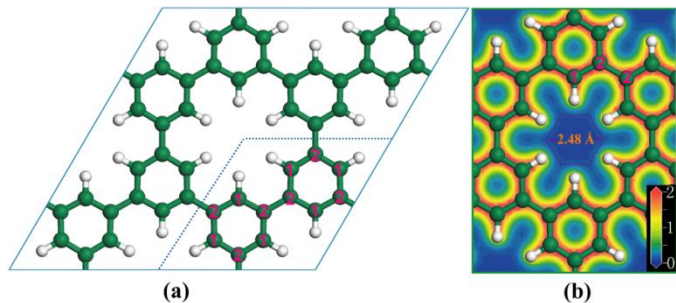




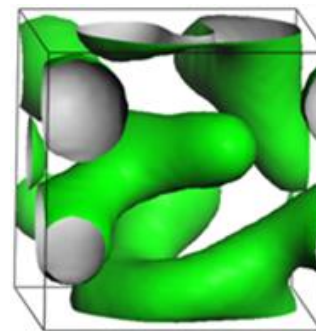
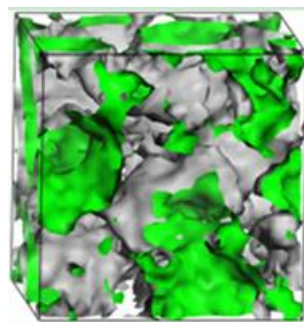
反应物的活性位点



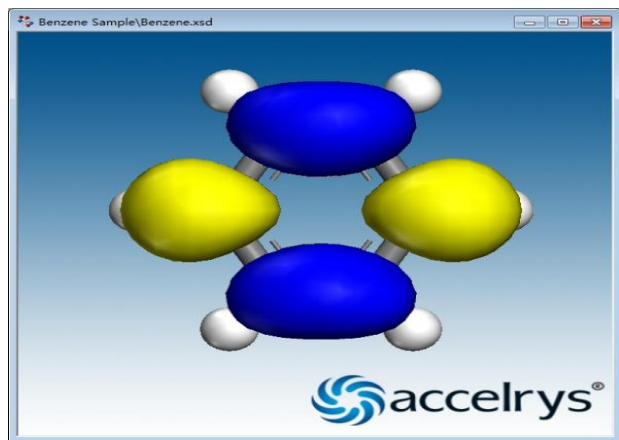
能带结构——超导材料



电子密度等值面



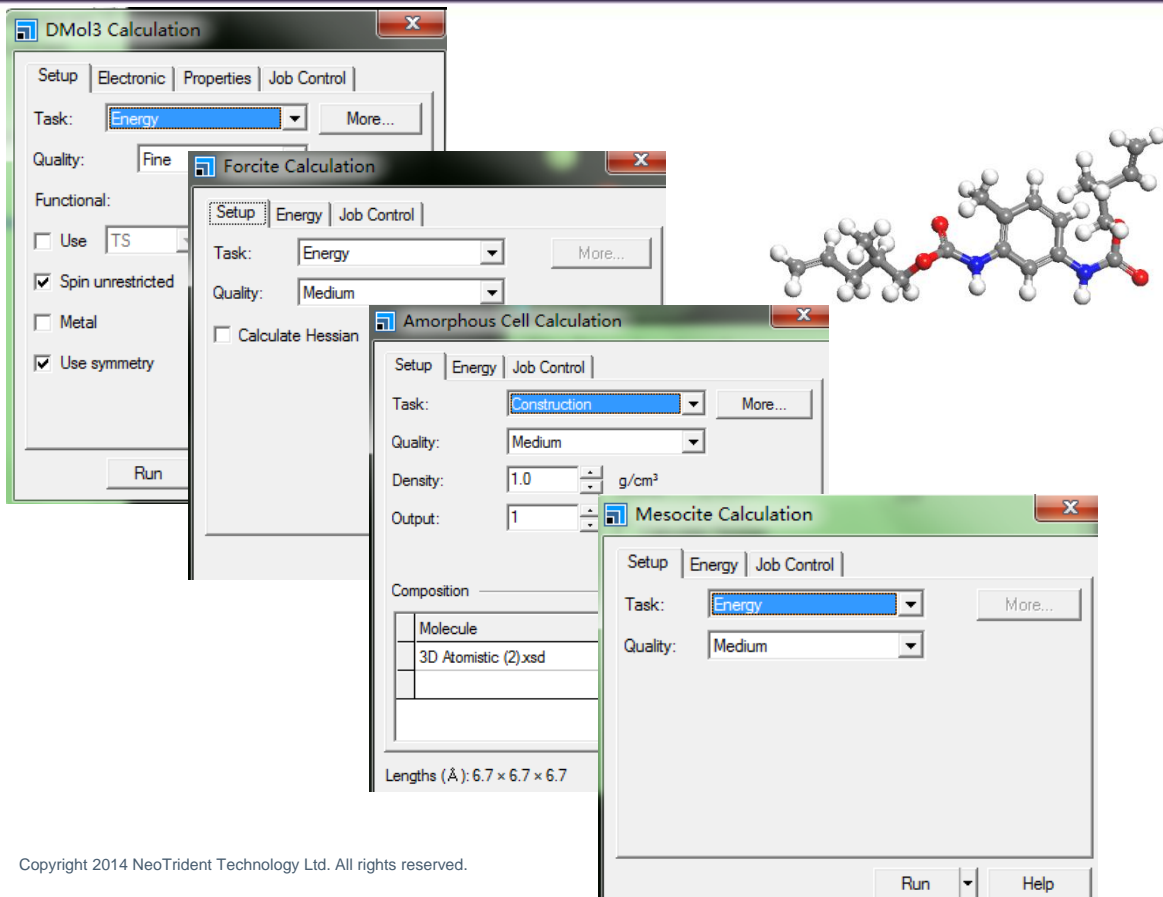
高分子共混体系等密度图



MS Gateway



# 可扩展的操作方式

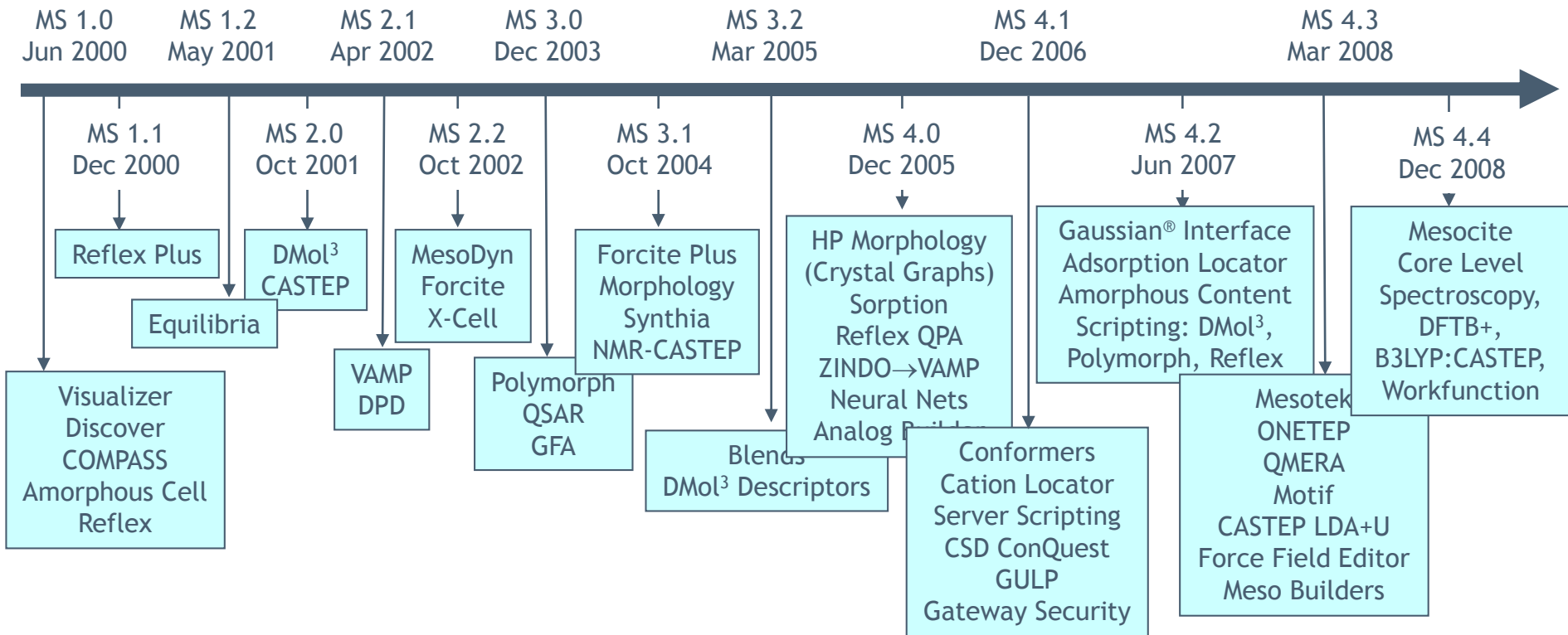


结构

模块面板提交计算

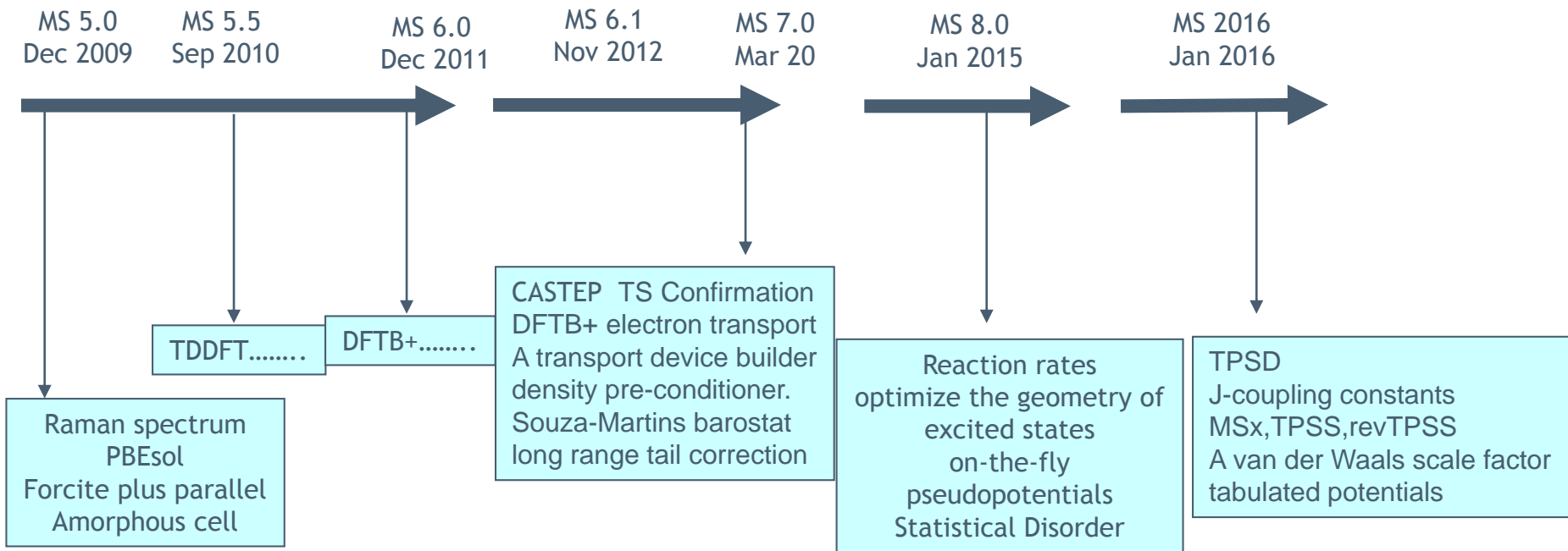
分析计算结果

# 完善而专业的技术支持——定期升级





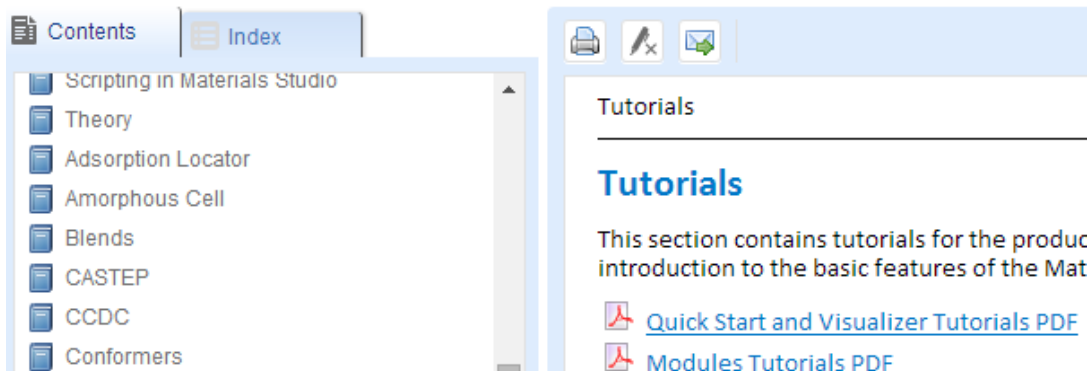
# 完善而专业的技术支持——定期升级



# 完善而专业的技术支持——完备的产品使用手册

## 所有模块原理、参数意义、操作教程

### BIOVIA | Materials Studio 2016 Online Help











### Accessing printable help

Many sections of the Materials Studio online help are also available in PDF format.

➤ Click on a link below or in a section introduction topic to view the PDF format documentation.

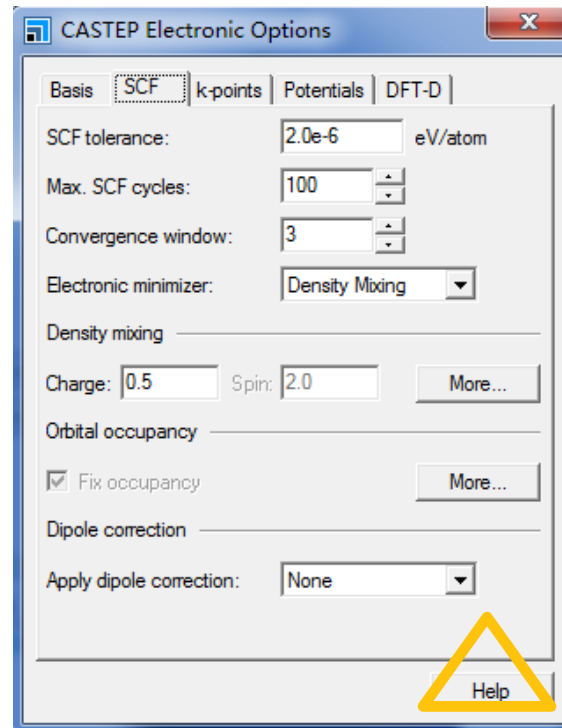
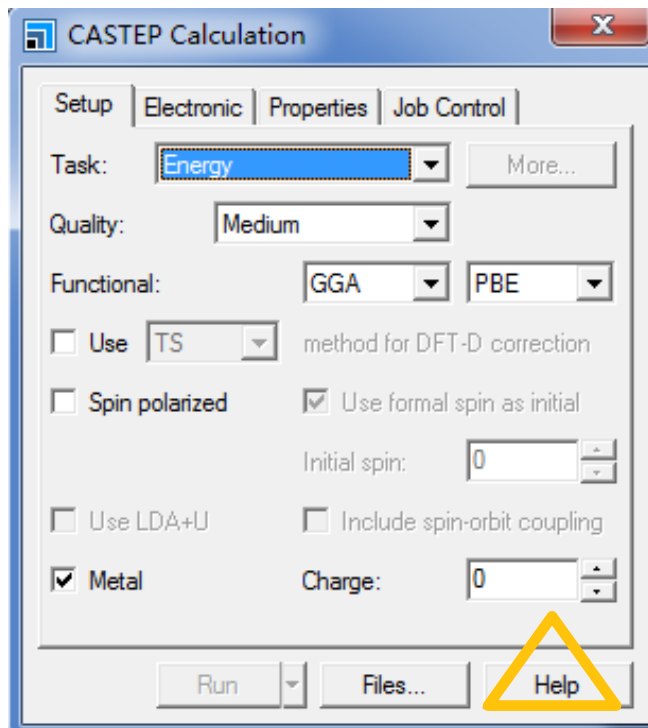
**IMPORTANT!** In order to view the PDF format documentation installed, visit <http://get.adobe.com/reader/>.

### Materials Visualizer

-  [Materials Studio Installation and Administration Guide](#)
-  [Materials Visualizer](#)
-  [Sketching and Editing Structures](#)
-  [Visualizer Tools](#)
-  [Building Tools](#)
-  [MaterialScript User Guide](#)
-  [MaterialScript API](#)
-  [Materials Studio Background Theory](#)

















### Tutorials

# 完善而专业的技术支持——完备的产品使用手册



售后技术支持邮箱 [ms@neotrident.com](mailto:ms@neotrident.com)

## 每日统计、每信必复

 ms@neotrident.com	10:42	
截止今天未解决的问题		
 ms@neotrident.com	10:34	
Re: 回复: mesodyn计算报错问题		
 ms@neotrident.com	10:29	
回复: 回复: Visualizer-交替层状结构的搭...		
 熊辉	10:29	
castep-结构对称性		
 王文滢(WANG Wenxi)	10:21	
Re: Problems from SUSTC		
 ms@neotrident.com	10:17	
回复: 回复: Forcite-吸附构象-动力学计算		
 飞舞天使	10:09	
回复: Visualizer-交替层状结构的搭...		
 王倩倩	10:03	

发送时间: 2016/4/13 (周三) 7:45

收件人: 阳光一起来

抄送: ms

杨琦同学, 您好。

**Q: 用 Scripting 文件夹下面的 HBondStats.pl 文件进行分析, 弹出 Illegal division by zero at -e line 42 错误提示。**

**A: 氢键统计脚本使用前, 请对体系进行进行 Calculate Hydrogenbond 的处理, 确保体系内氢键被正常标示出来。否则就会出现此错误。**

**Q: 在 HBond\_Evolution.pl 脚本文件只能对轨迹文件进行氢键分析吗?**

**A: 是, 该脚本编写即针对模拟轨迹进行氢键分析。**

复制(C)

# 完善而专业的技术支持——创腾学院培训中心



## 各级别软件课程培训；网络公开课



登录 | 注册 | 创腾官网 | 官方微博 | 联系我们

Call Us: 021-58353866

### 2015年创腾科技Materials Studio培训班合影留念

2015年8月10日



学院首页

培训新闻

培训课程

培训讲师

学员服务

学院介绍

在线报名

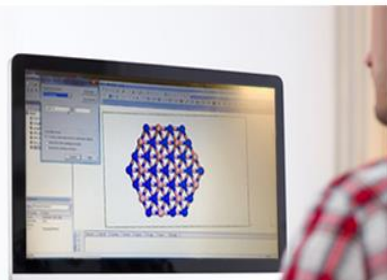
培训联系

### 材料模拟软件培训

2016年上半年(1~7月份)

Materials Studio 培训班安排通告

了解详情



### 创腾科技培训中心

提升研发能力、加速研发进程、  
带您进入全球顶尖的研发中心

了解更多

01-15号: 张良静 温文娟 于慧 曹烁 李士娜 李亚玲 李明宪 刘文贤 王春英 庞亚丽 焦丽娜 陈晶晶 胡萌 陈巧玲 郑焱  
16-30号: 吕增涛 周传仓 王鹏 肖超 黄文登 李永峰 凌云汉 毛多鹭 宋晨 胡延强 孙树娟 王鑫阳 韩清珍 高志远 许真铭  
31-45号: 左小超 张磊 周文翰 雷庭俞 刘文贤 史乾涛 李硕 李勇 刘威 赵莹 邵栋元 吴超 吉宗威 王鹏 张连基  
46-53号: 高景花 苏巧智 闫红 付作鑫 李柯志 李想 杜江涛 刘福柱



完善而专业的技术支持——用户交流研讨会



# 第七届国际分子模拟与信息技术应用学术会议

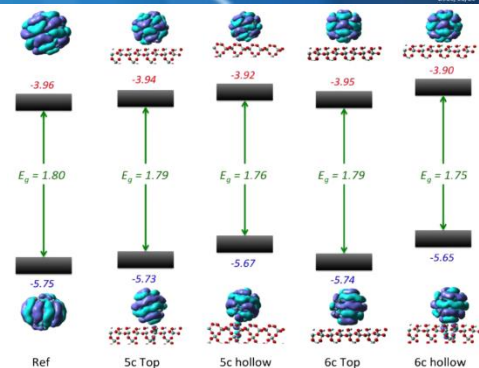
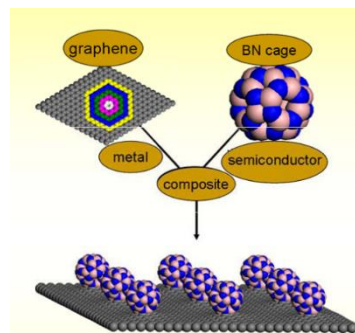
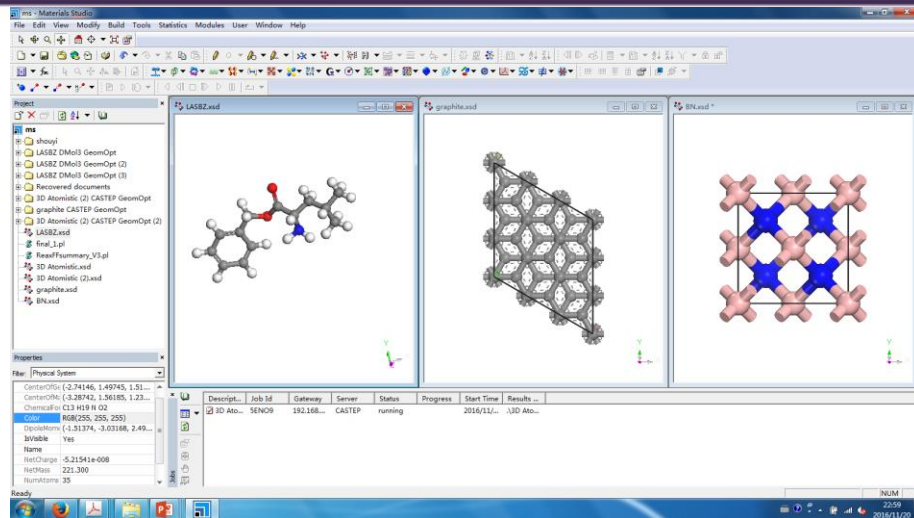
2014年10月27日





# 主要内容：

- ❖ 分子模拟意义
- ❖ MS分子模拟软件
- ❖ **MS**在材料研究中的应用





<http://www.neotrident.com/service/jiang.aspx>

[点击查看：2014年度奖学金获奖者名单](#)

[点击查看：2015年度奖学金获奖者名单](#)

## 2015年度影响因子总和排名

排名	作者	单位	影响因子总和	文章数目	积分总和
1	公不富	中科院理化技术研究所	88.062	10	98.062
2	董慧龙	苏州大学功能纳米与软物质研究院	68.94	9	77.94
3	胡文成	南昌大学	21.517	11	32.517
4	胡盟	燕山大学 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室	25.598	6	31.598
5	张丙凯	华中科技大学 能源与动力工程学院	19.997	5	24.997
6	李雨航	华南理工大学 化学与化工学院	18.92	4	22.92
7	王卷龙	中国科学院近代物理研究所	16.58	6	22.58
8	胡清	中国科学院金属研究所 沈阳材料科学国家实验室	18.342	4	22.342
9	袁大强	中国科学院福建物质结构研究所 结构化学国家重点实验室	19.824	2	21.824
10	朱黎	吉林大学	20	1	21

[点击下载【第一期Materials Studio电子杂志】](#)

[【第二期Materials Studio电子杂志】](#)

[【第三期Materials Studio电子杂志】](#)

[【第四期Materials Studio电子杂志】](#)

[【第五期Materials Studio电子杂志】](#)

想获得更多电子杂志，请参与我们的奖学金计划

您可以点击以下分类查看文章  
(年度最后一周公布)

金属材料

无机非金属材料

高分子材料

复合材料

创腾学院 百度搜索 x 欢迎您登录创腾学院 x 创腾科技有限公司官网 x +

rvic/list.aspx?id=135

常用网址

奖学金计划

- 材料科学
- 生命科学
- 服务体系
- 资源下载
- 技术问答
- 客户留言

推荐产品 MORE

NeoSuite CMS 化学试剂管理系统

推荐活动 MORE

11-12月份 Materials Studio / Discovery Studio 模拟软件培训班 课程安排抢先看!

视频焦点 MORE

### 无机非金属材料

- 一种新的铅钨酸盐, PbBa<sub>2</sub>(B<sub>3</sub>O<sub>6</sub>)<sub>2</sub>的合成, 晶体结构和光学性质 2015-03-16
- 深紫外非线性光学硼酸盐LiMn-1B2n-1O4n-2 (M=Ca/Rb, n=3, 4, 6)中p-(p, π)相互作用机理和据此设计的新材料 2015-03-12
- Cl<sub>18</sub>Mg<sub>6</sub>(B<sub>5</sub>O<sub>10</sub>)<sub>3</sub>(B<sub>7</sub>O<sub>14</sub>)<sub>2</sub>F(Q=Rb and Cs)包含两个较大的独立的并具有相似拓扑的聚硼氧阴离子新型硼酸盐 2015-03-12
- Pb<sub>16</sub>(OH)<sub>16</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>16</sub>: 一种有大偏频效应的硼酸盐非线性光学晶体 2015-03-12
- Pb<sub>3</sub>B<sub>6</sub>O<sub>11</sub>F<sub>2</sub>: 第一个具有强偏频效应的非中心对称的铅硼酸盐晶体 2015-03-12
- MBa<sub>2</sub>B<sub>5</sub>O<sub>9</sub>(M = Na, K): 两种复合金属硼酸盐的合成, 结构, 光学性质及电子结构 2015-03-12
- Li<sub>3</sub>Cs<sub>2</sub>B<sub>5</sub>O<sub>10</sub>的晶体生长电子能带结构和态密度计算 2015-03-12
- K<sub>3</sub>B<sub>6</sub>O<sub>10</sub>B晶体的非线性光学性质的实验和理论研究 2015-03-12
- Cs<sub>3</sub>Zn<sub>6</sub>B<sub>9</sub>O<sub>21</sub>具有KBF<sub>4</sub>族化合物中最大的偏频效应的化学改性化合物 2015-03-12
- Cs<sub>2</sub>B<sub>4</sub>SiO<sub>9</sub>一种深紫外非线性光学晶体 2015-03-12
- Ba<sub>2</sub>B<sub>10</sub>O<sub>17</sub>: 一个新的中心对称的可深紫外截止的碱土金属硼酸盐 2015-03-12
- M-B-O-X (M: 碱金属; X: 卤素)系统中探索新化合物Na<sub>3</sub>B<sub>6</sub>O<sub>10</sub>B的: 制备, 晶体结构电子结构和光学性质 2015-03-12
- 一种新的锂铅五硼酸盐LiPb<sub>2</sub>B<sub>5</sub>O<sub>10</sub>的合成, 晶体结构和光学性质 2015-03-12
- 一种新的钾铅五硼酸盐KPb<sub>2</sub>B<sub>5</sub>O<sub>9</sub>的合成, 晶体结构, 光学性质和理论研究 2015-03-12
- 新离子硼酸盐 Li<sub>3</sub>Ca<sub>9</sub>(B<sub>3</sub>O<sub>7</sub>)<sub>2</sub>[LiF]<sub>2</sub>BO<sub>3</sub>三角形共面且高密度的紫外非线性光学材料 2015-03-12
- 新的组(VI)的硼酸盐的合成, 结构特性, 计算中心的RbMo<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>4</sub>和非中心的Rb<sub>4</sub>Mo<sub>5</sub>P<sub>2</sub>O<sub>22</sub> 2015-03-12
- 设计具有大的二次谐波响应的深紫外非线性光学材料 2015-03-12
- 理论结合实验研究 Bi<sub>2</sub>Zn<sub>2</sub>O<sub>6</sub>晶体的非线性光学效应 2015-03-12
- 刚性单元程架上对称性的影响: 设计合成非中心的NaBa<sub>4</sub>(Al<sub>4</sub>O<sub>9</sub>)<sub>2</sub>B<sub>3</sub>和中心的NaBa<sub>4</sub>(B<sub>5</sub>O<sub>9</sub>)<sub>2</sub>F<sub>2</sub>Cl 2015-03-12
- 第一性原理计算复合碱金属硼酸盐LiK<sub>2</sub>B<sub>2</sub>P<sub>2</sub>O<sub>8</sub>, Li<sub>3</sub>K<sub>2</sub>B<sub>4</sub>P<sub>4</sub>O<sub>14</sub>的电子结构和非线性光学性质 2015-03-12

## 丰田公司设计目标：新一代汽车用合金材料



借助**MS**计算得到每一种比例合金的力学性质、稳定性。筛选得到一些非常有希望的配方比例：

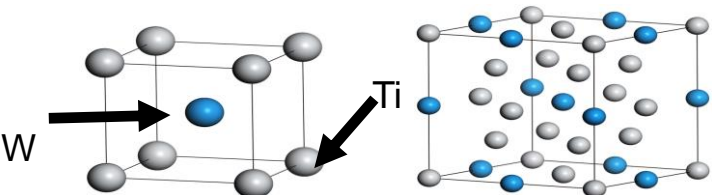
$Ti_{0.75}W_{0.25}$ ,  $Ti_{0.25}W_{0.75}$ ,  $Ti_{0.75}Mo_{0.25}$ ,  $Ti_{0.5}Mo_{0.5}$ ,  $Ti_{0.25}Mo_{0.75}$



以金属Ti为基础的合金 $Ti_{1-m}X_m$

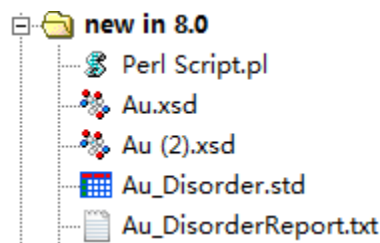
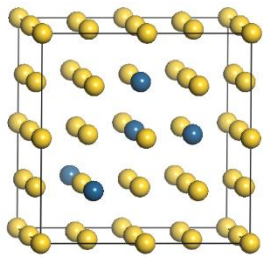
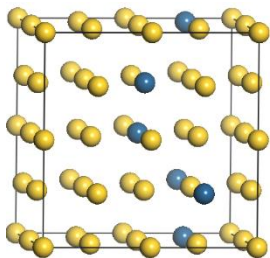
(X = V, Nb, Ta, Mo, W)

Ti	$Ti_{.99}W_{.01}$	$Ti_{.98}W_{.02}$	$Ti_{.97}W_{.03}$	$Ti_{.96}W_{.04}$	$Ti_{.95}W_{.05}$	$Ti_{.94}W_{.06}$	$Ti_{.93}W_{.07}$	$Ti_{.92}W_{.08}$	$Ti_{.91}W_{.09}$
	$Ti_{.90}W_{.10}$	$Ti_{.89}W_{.11}$	$Ti_{.88}W_{.12}$	$Ti_{.87}W_{.13}$	$Ti_{.86}W_{.14}$	$Ti_{.85}W_{.15}$	$Ti_{.84}W_{.16}$	$Ti_{.83}W_{.17}$	$Ti_{.82}W_{.18}$
	$Ti_{.81}W_{.19}$	$Ti_{.80}W_{.20}$	$Ti_{.79}W_{.21}$	$Ti_{.78}W_{.22}$	$Ti_{.77}W_{.23}$	$Ti_{.76}W_{.24}$	$Ti_{.75}W_{.25}$	$Ti_{.74}W_{.26}$	$Ti_{.73}W_{.27}$
	$Ti_{.72}W_{.28}$	$Ti_{.71}W_{.29}$	$Ti_{.70}W_{.30}$	$Ti_{.69}W_{.31}$	$Ti_{.68}W_{.32}$	$Ti_{.67}W_{.33}$	$Ti_{.66}W_{.34}$	$Ti_{.65}W_{.35}$	$Ti_{.64}W_{.36}$
	$Ti_{.63}W_{.37}$	$Ti_{.62}W_{.38}$	$Ti_{.61}W_{.39}$	$Ti_{.60}W_{.40}$	$Ti_{.59}W_{.41}$	$Ti_{.58}W_{.42}$	$Ti_{.57}W_{.43}$	$Ti_{.56}W_{.44}$	$Ti_{.55}W_{.45}$
	$Ti_{.54}W_{.46}$	$Ti_{.53}W_{.47}$	$Ti_{.52}W_{.48}$	$Ti_{.51}W_{.49}$	$Ti_{.50}W_{.50}$	$Ti_{.49}W_{.51}$	$Ti_{.48}W_{.52}$	$Ti_{.47}W_{.53}$	$Ti_{.46}W_{.54}$
	$Ti_{.45}W_{.55}$	$Ti_{.44}W_{.56}$	$Ti_{.43}W_{.57}$	$Ti_{.42}W_{.58}$	$Ti_{.41}W_{.59}$	$Ti_{.40}W_{.60}$	$Ti_{.39}W_{.61}$	$Ti_{.38}W_{.62}$	$Ti_{.37}W_{.63}$
	$Ti_{.36}W_{.64}$	$Ti_{.35}W_{.65}$	$Ti_{.34}W_{.66}$	$Ti_{.33}W_{.67}$	$Ti_{.32}W_{.68}$	$Ti_{.31}W_{.69}$	$Ti_{.30}W_{.70}$	$Ti_{.29}W_{.71}$	$Ti_{.28}W_{.72}$
	$Ti_{.27}W_{.73}$	$Ti_{.26}W_{.74}$	$Ti_{.25}W_{.75}$	$Ti_{.24}W_{.76}$	$Ti_{.23}W_{.77}$	$Ti_{.22}W_{.78}$	$Ti_{.21}W_{.79}$	$Ti_{.20}W_{.80}$	$Ti_{.19}W_{.81}$
	$Ti_{.18}W_{.82}$	$Ti_{.17}W_{.83}$	$Ti_{.16}W_{.84}$	$Ti_{.15}W_{.85}$	$Ti_{.14}W_{.86}$	$Ti_{.13}W_{.87}$	$Ti_{.12}W_{.88}$	$Ti_{.11}W_{.89}$	$Ti_{.10}W_{.90}$
	$Ti_{.09}W_{.91}$	$Ti_{.08}W_{.92}$	$Ti_{.07}W_{.93}$	$Ti_{.06}W_{.94}$	$Ti_{.05}W_{.95}$	$Ti_{.04}W_{.96}$	$Ti_{.03}W_{.97}$	$Ti_{.02}W_{.98}$	$Ti_{.01}W_{.99}$
									W

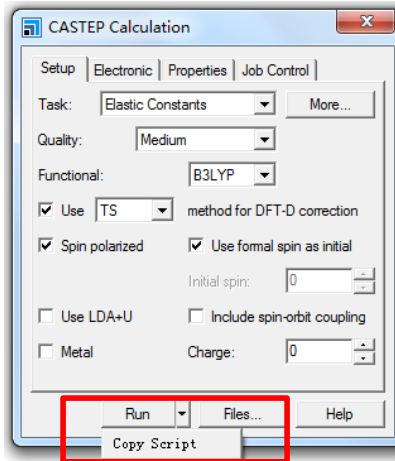


## 脚本示例：

```
use strict;  
use Getopt::Long;  
use MaterialsScript qw(:all);  
my $disorderedStructure = $Documents{"Au.xsd"}; 此处修改为你的结构名称  
my $results = Tools->Disorder->StatisticalDisorder->GenerateSuperCells  
($disorderedStructure,2,2,5); 此处修改为你算出来晶胞扩展倍数  
my $stable = $results->StudyTable;  
print "Number of disorder configurations generated: ".$results->NumIrreducibleConfigurations."\n";
```



	Structures	Weighting	Configuration
	00	64	bbbbbbabbbabbbbbbbaabbbbbb
1	01	384	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
2	02	192	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
3	03	768	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
4	04	256	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
5	05	768	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
6	06	192	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
7	07	256	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
8	08	768	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
9	09	384	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb
10	10	64	bbbbbbabbbbbbbaabbbbbb



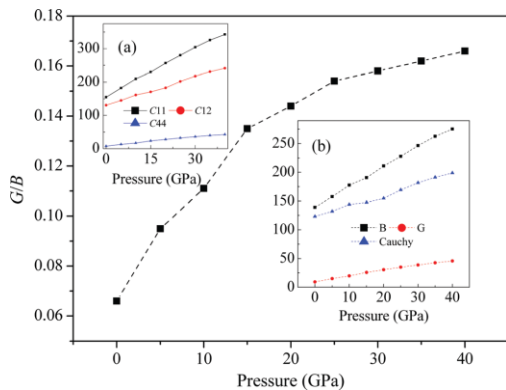
支持使用脚本建模、  
模块调用、性质分析



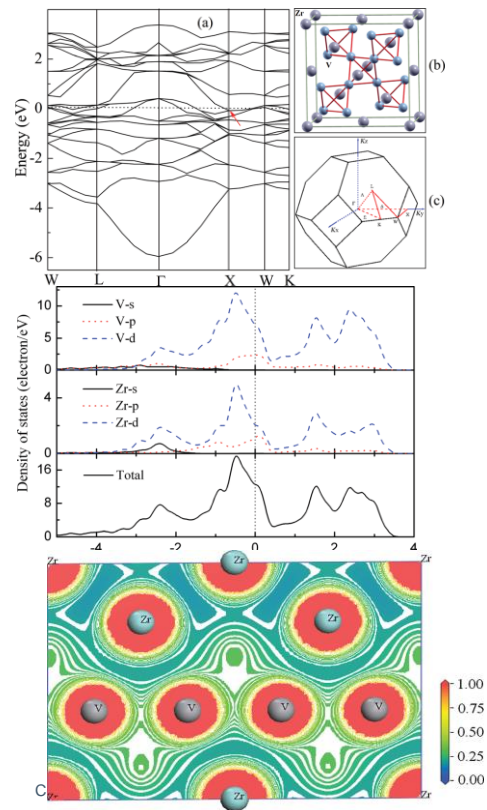
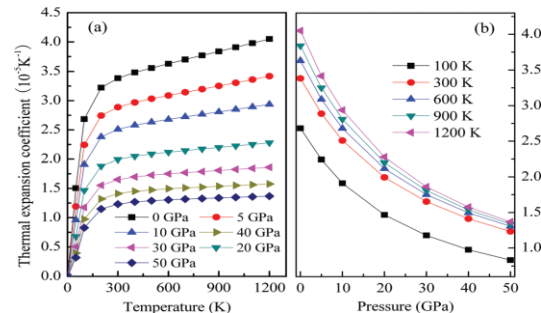
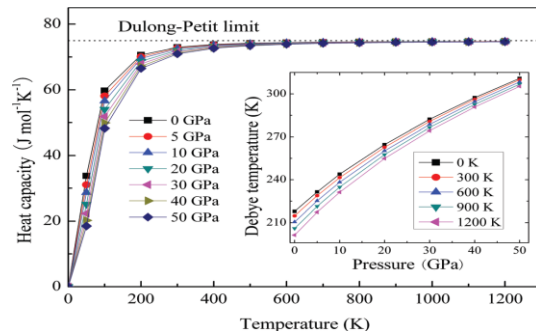
## 不同压力下Laves相ZrV<sub>2</sub>的结构、弹性和热力学性质

通过准谐德拜模型，基于E-V数据，计算不同温度和压力条件下ZrV<sub>2</sub>的热力学性质

不同压力下的弹性常数、体积模量、剪切模型、杨氏模量及柯西压力

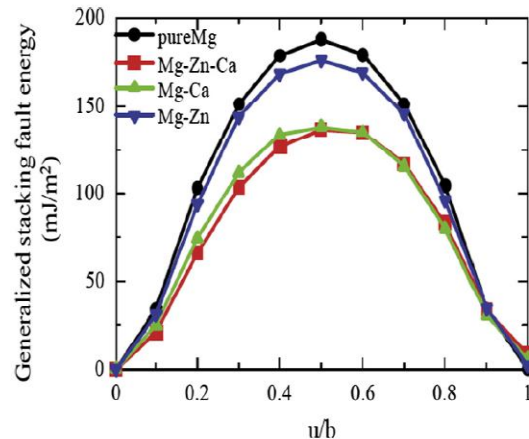
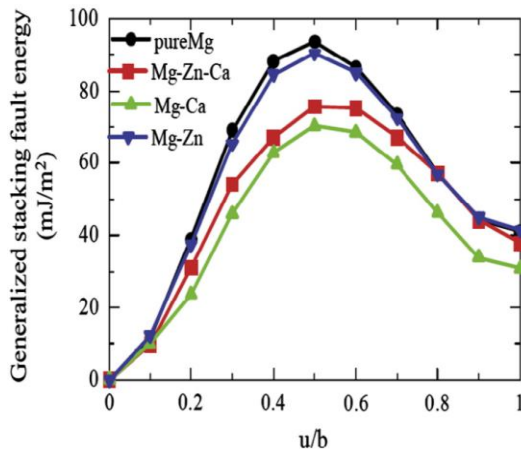
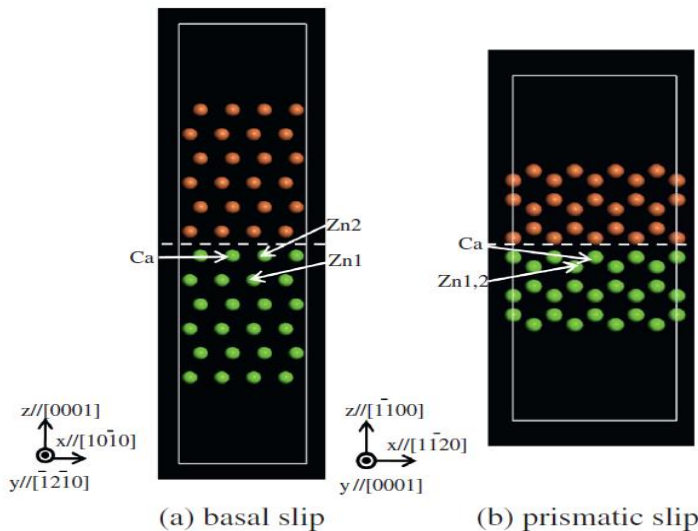


P (GPa)	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>	B	G	E	G/B	Cauchy (C <sub>12</sub> - C <sub>44</sub> )
0	155.2	131.0	7.6	139.0	9.2	26.9	0.066	123.36
20	256.9	182.7	28.0	210.8	30.5	87.2	0.144	154.76
40	342.9	241.4	42.5	275.3	45.6	129.7	0.166	198.96





## 改善Mg-Zn-Ca合金的塑性各向异性使其具有高成形性的第一性原理研究



**结论：**Mg-Ca和Mg-Zn合金基面的层错能比纯Mg的要低。添加Ca和Zn元素降低了层错能

**Mg-Zn-Ca模型的 $r_{us}(\text{basal})/r_{us}(\text{prism})$  的值最接近于1，因此塑性各向异性有所改善（趋于各向同性），并导致了基面结构的降低，从而导致了更好的成形性。**

棱面滑移体系中，Mg-Zn-Ca体系具有最低的层错能。

### 1、基面滑移体系：左图a，

Mg-Zn-Ca和Mg-Ca模型，其滑移面位于包含Ca原子的层和Ca原子层上面的第一层之间

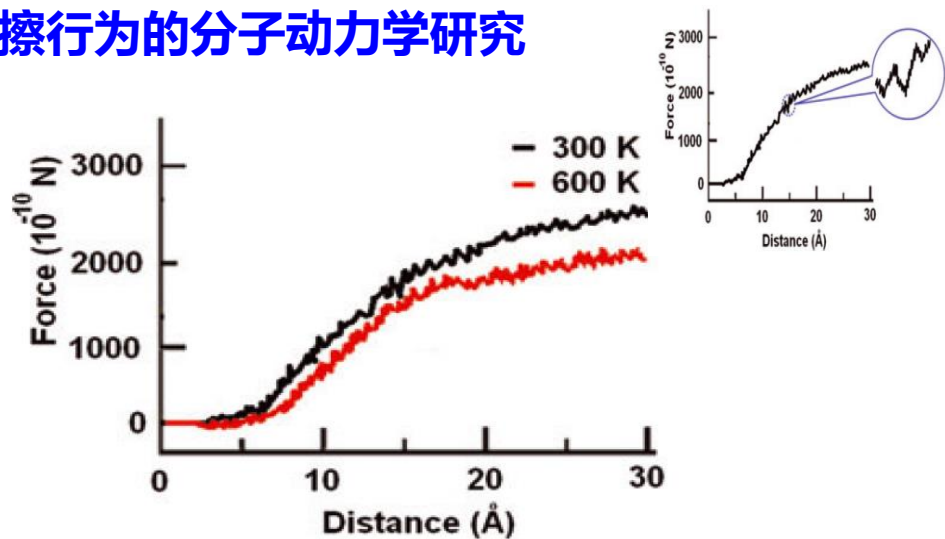
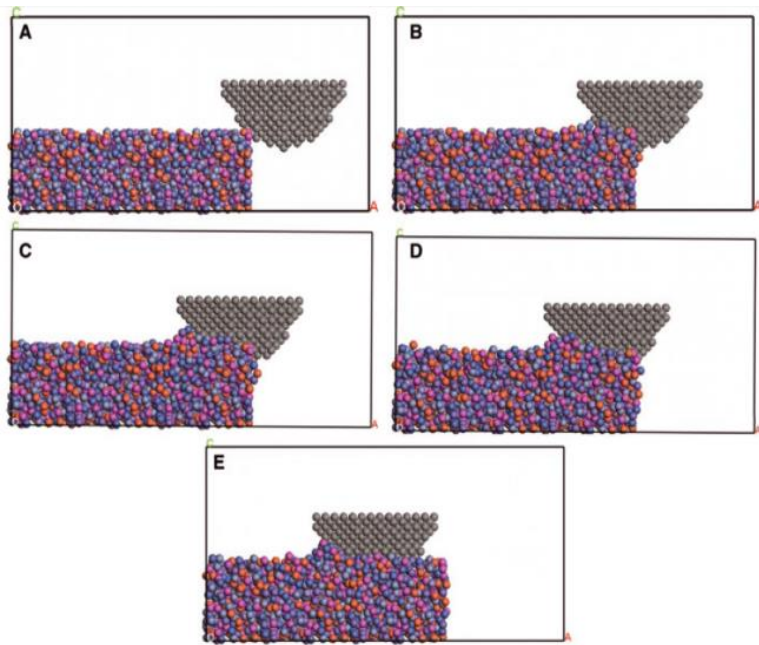
Mg-Zn模型，滑移面位于包含Zn原子（Zn2）和它上面的第一层之间。

### 2、棱面的滑移体系：左图b

Mg-Zn-Ca和Mg-Ca模型，滑移面位于包含Ca的层和它上面的一层之间。

Mg-Zn模型，滑移面位于包含Zn原子的层上面的第一层和第二层之间。

## 高熵合金Al-Co-Cr-Fe-Ni的摩擦行为的分子动力学研究



图、300k和600k条件下，切割深度为0.28Å的纳米刻划模拟的力和位移曲线。

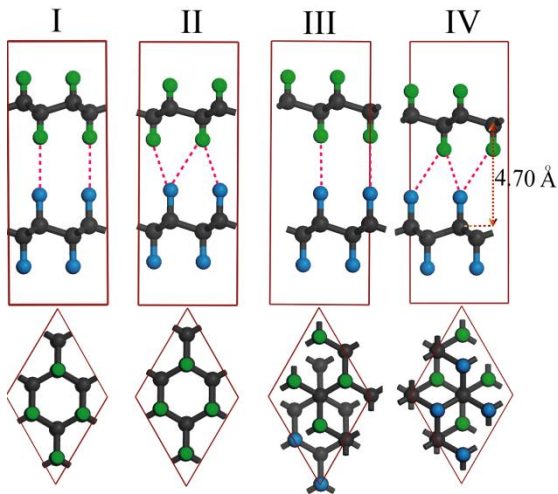
1、随着温度的升高，导致刻划力的降低，即温度升高，高熵合金的强度降低。

2、在高温下也同样观察到了加工硬化现象，但加工硬化的程度随着温度的升高有所降低。

以250 m/s 的切割速度进行刻划加工模拟，在不同距离处的模拟结果

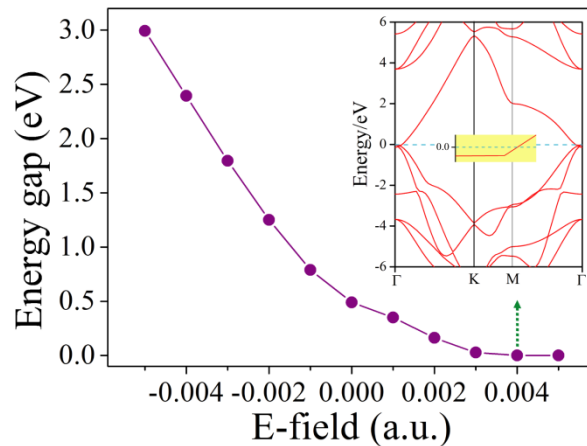
## 石墨烷/氟化石墨烯双层结构的理论研究

### □ 石墨烷/氟化石墨烯结构设计



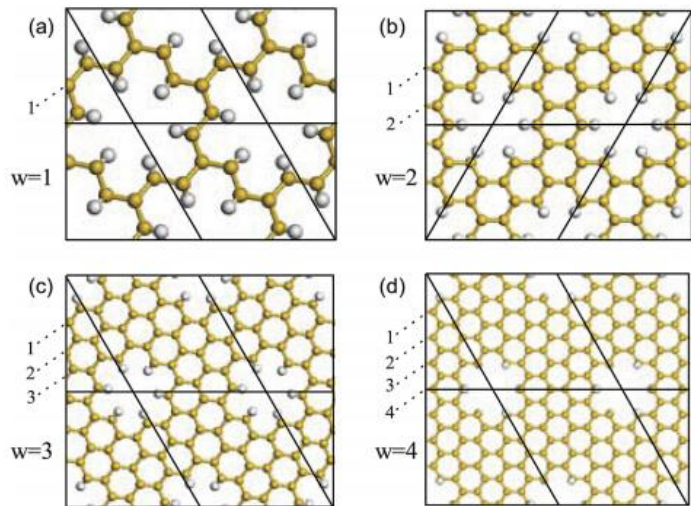
石墨烷/氟化石墨烯的四种可能组装结构

### □ 电场对于带隙的影响

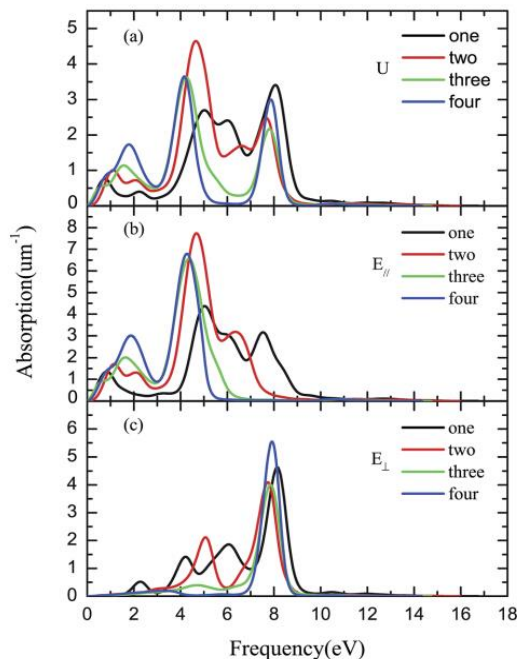


石墨烷/氟化石墨烯双层结构的带隙随外加电场的变化关系曲线。

## 硅烯纳米孔洞的电学和光学性质



四种结构图分别被标为{1,1}、{1,2}、{1,3}、{1,4}  
每一种类型的SNMs被定义为{1, W}, 这里的1代表一个被移除的六角硅链。W代表相连孔洞硅链的宽度。

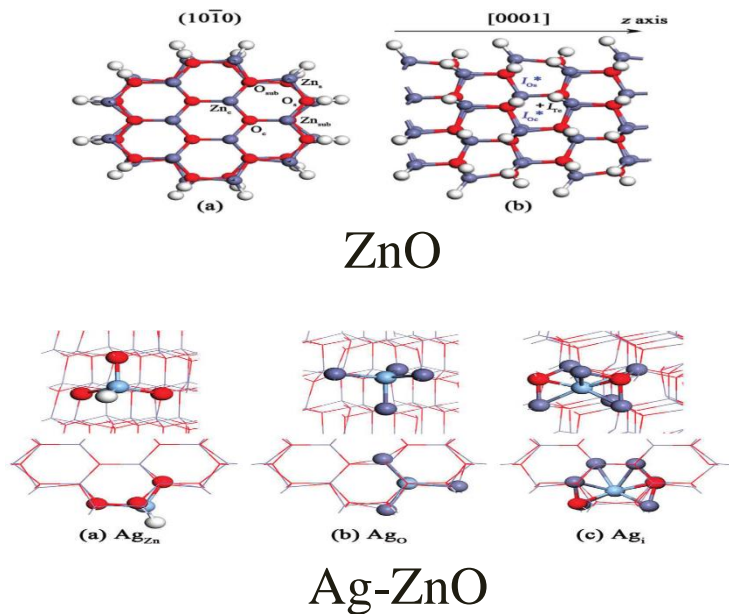


**光吸收谱：**反应当光波穿过材料时能量损失的部分

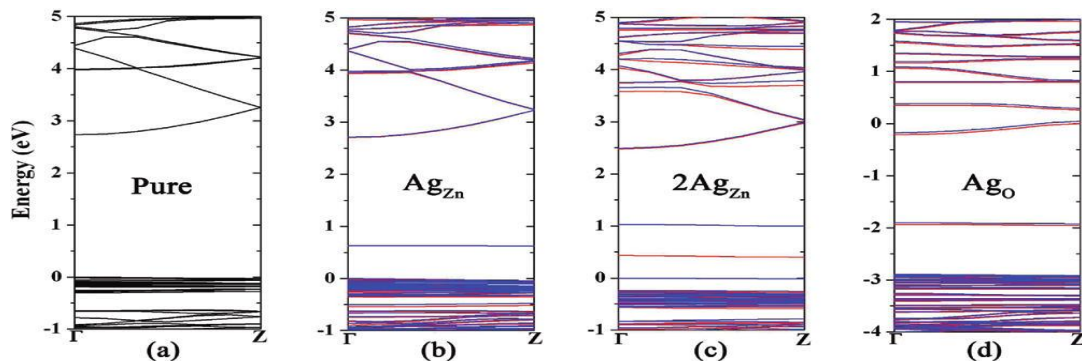
**从图中可见：**SNMs具有宽频光响应区域从0eV到10eV

**说明：**光学性质可以通过W值的变化控制

## Ag掺杂ZnO纳米线的结构、电子和光学性质



### 能带结构的解析

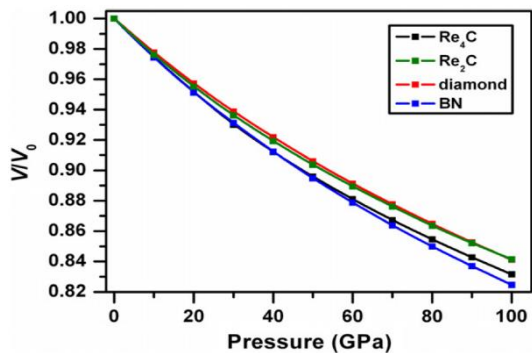
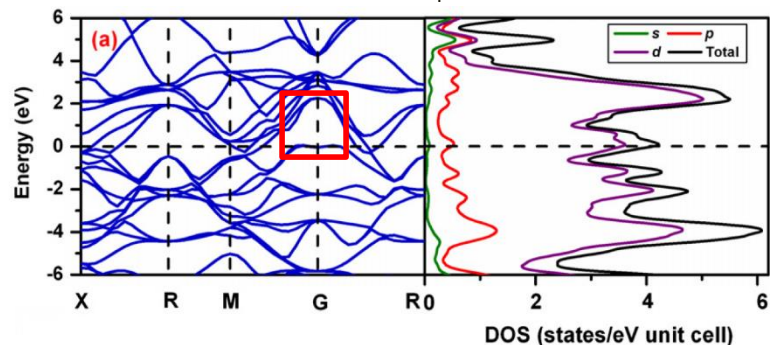


- 相比纯的ZnO纳米线，Ag的掺杂使得ZnO纳米线成为p型半导体。
- Ag掺杂量的增加，可以看到p型ZnO半导体行为更好。

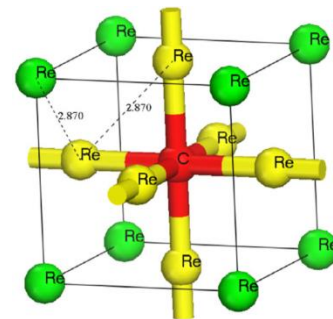
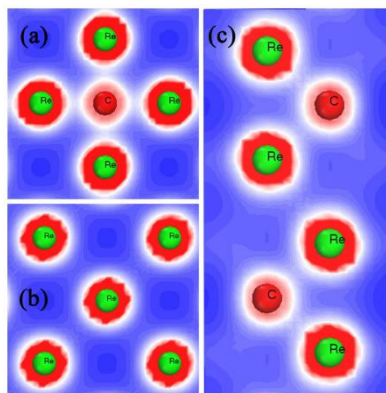


## 超导超硬不可压缩的立方 $\text{Re}_4\text{C}$

立方  $\text{Re}_4\text{C}$



键合性质、硬度



Crystal	Bond type	Bond length $d$ (Å)	Bond overlap population $P$
$\text{Re}_4\text{C}$	Re-C	2.029	0.31
	$\text{Re}_{\text{green}}-\text{Re}_{\text{yellow}}$	2.870	0.22
	$\text{Re}_{\text{yellow}}-\text{Re}_{\text{yellow}}$	2.870	0

- Re-C原子间有较大的电子密度，预示Re-C有较强的键合
- Re-Re之间也有一定程度的键合

Materials Studio输出的结果

- ◆ 键长
- ◆ 布居数
- ◆ 体积
- ◆ 键密度
- ◆ 电子密度

.....

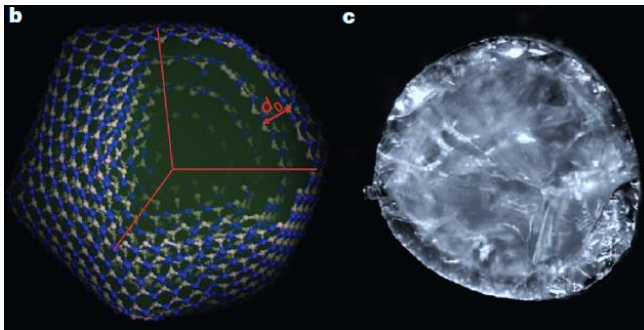
## 宏观硬度的微观理论模型

$$H_v(\text{GPa}) = 42N_a e^{-1.191f_i - 32.2f_m^{0.55}} E_h,$$

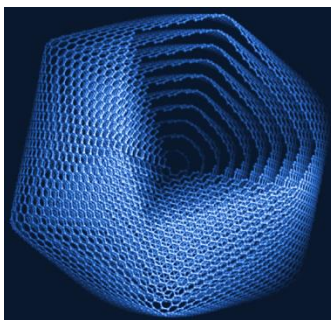
$$H_v(\text{GPa}) = 1051N_e^{2/3} d^{-2.5} e^{-1.191f_i - 32.2f_m^{0.55}}$$

Copyright 2014 NeoTrident Technology Ltd. All rights reserved.

**Nature 493 (2013) 385-388**



**Nature 510 (2014) 250-253**



## Ti<sub>3</sub>SnC<sub>2</sub>的相稳定性、电子结构、压缩性、弹性和光学性质:第一性原理研究

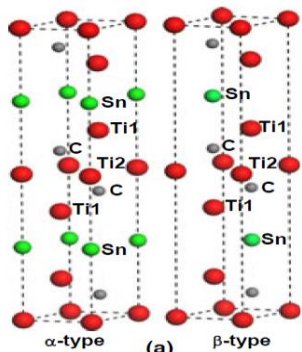
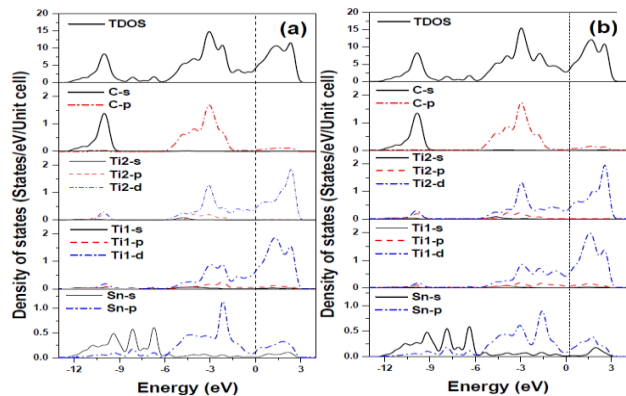
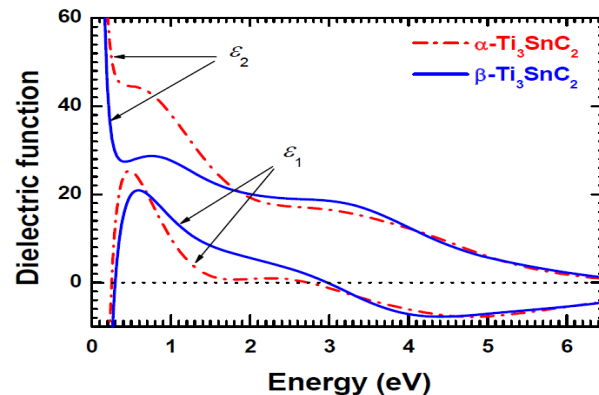
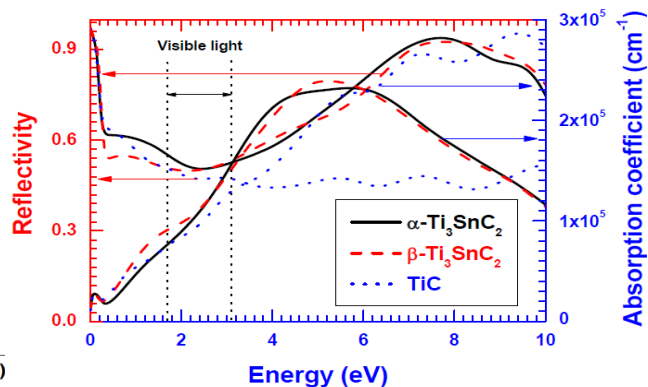


图 1 Ti<sub>3</sub>SnC<sub>2</sub> 的两种多晶形态

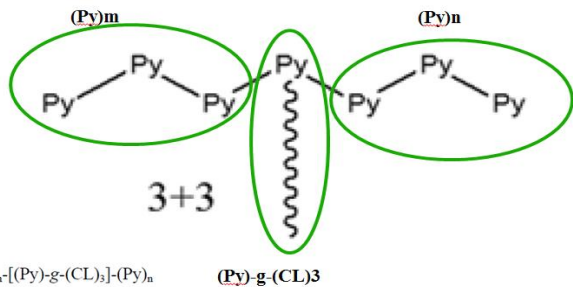
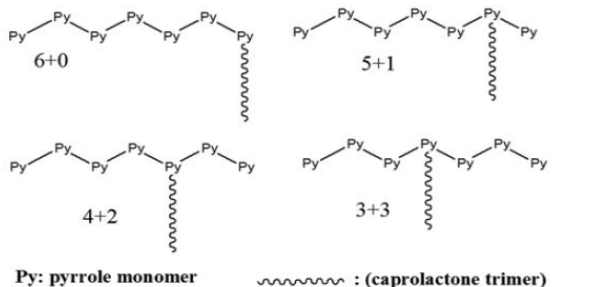


从态密度图得, Ti<sub>3</sub>SnC<sub>2</sub>表现出良好的导体特性;

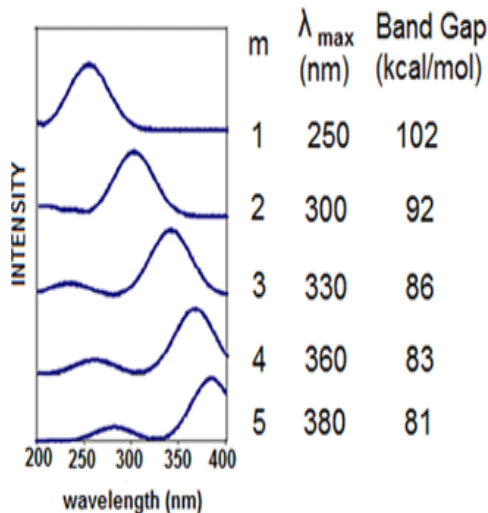
Ti<sub>3</sub>SnC<sub>2</sub> 与 Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub> 将表现相同的颜色, 金属灰 (metallic gray);

Ti<sub>3</sub>SnC<sub>2</sub> 能够吸收无线电波到紫外的能量谱中的光子的能量。

## 聚ε-己内酯 (PCL) 接枝的聚吡咯 (PPy) 的结构, 电学, 形貌的理论研究



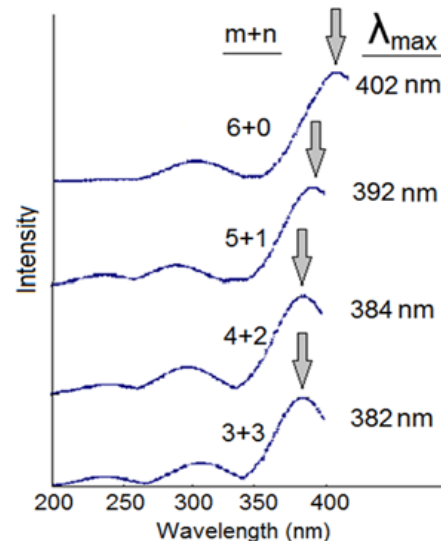
**模型一:  $(Py)_m-[(Py)-g-(CL)_3]$  的紫外可见光谱,**  
增加吡咯 (Py) 单体的数目, m在1和5之间



随着Py单体数目的增加

- ◆ 紫外光谱的谱峰出现了红移
- ◆ 带隙变窄, 导电性增强。

**模型二:  $(Py)_m-[(Py)-g-(CL)_3]-(Py)_n$ ,**  
改变CL3的接枝位置



**共轭嵌段的长度比接枝的位置对光谱的影响更大。**

**模型:  $(Py)_m-(Py)-g-(CL)_3-(Py)_n$**   
其中 (m,n)=(6,0), (5,1), (4,2), (3,3)  
**改变CL3的接枝位置**



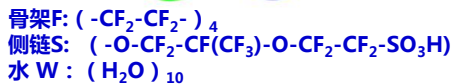
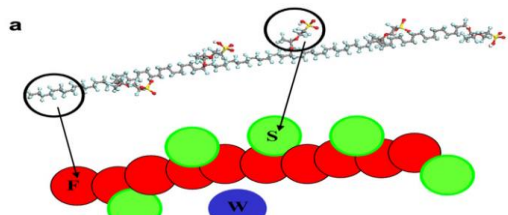
## 质子交换膜形貌对其机械性能影响的介观尺度模拟

质子交换膜的纳米级形貌强烈会影响其质子电导率和机械性能

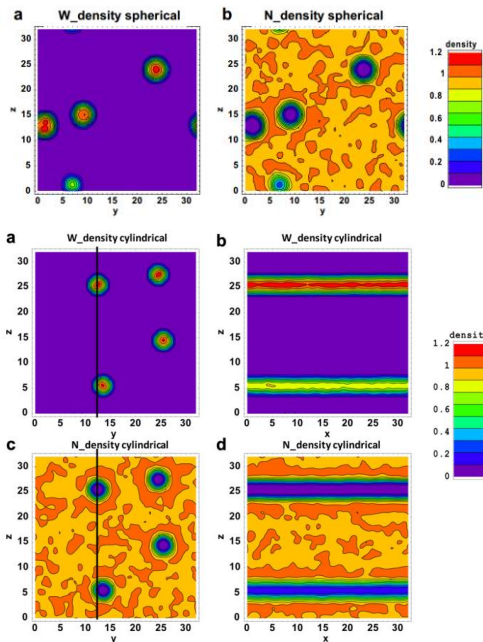
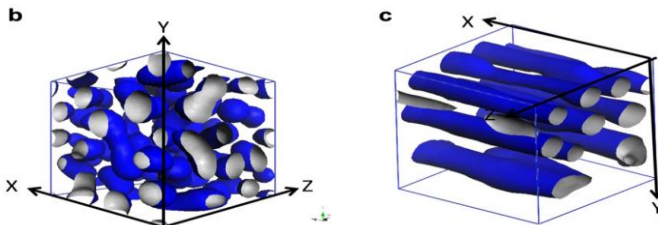
球状

柱状x

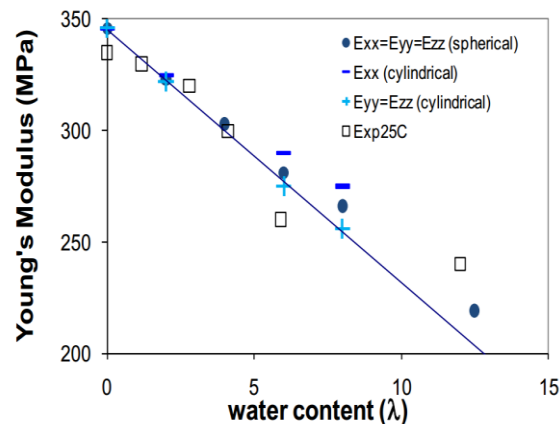
柱状y



PFSA (全氟磺酸离子交换树脂) 粗粒化模拟代表性形貌



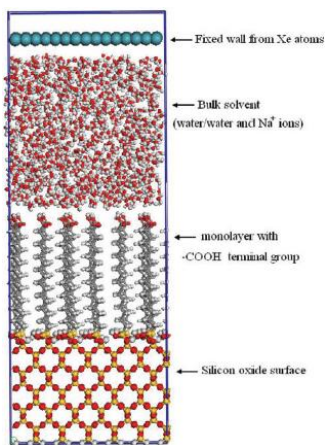
$\lambda=2$ 时球状、柱状水 (a) 和PFSA (b) 相密度分布剖面图



不同水含量时理论和实验杨氏模量比较

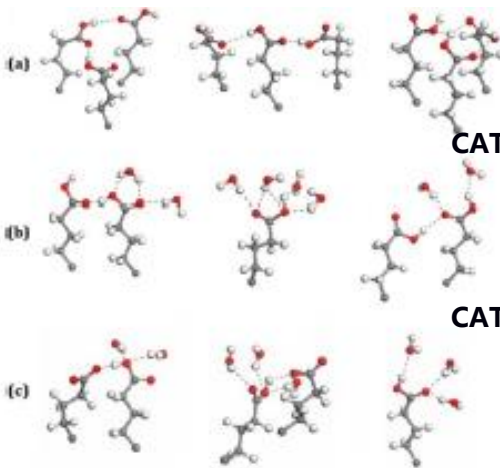


## 羧酸为端位的自组装单层膜结构的分子力学模拟和杂化的量子力学 - 分子力学振动模式的分析



真空环境

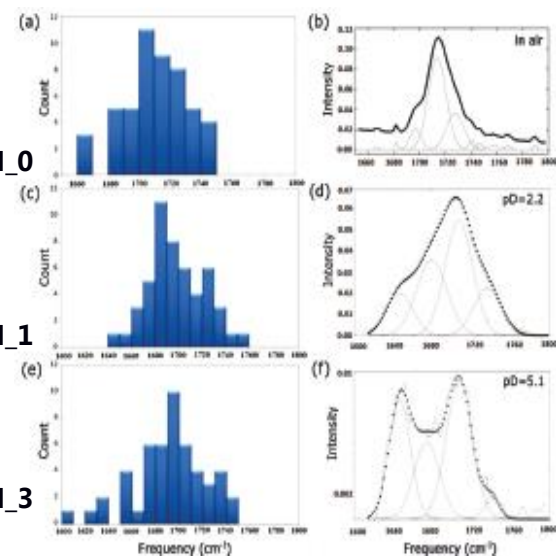
水环境



CATSAM\_0

CATSAM\_1

CATSAM\_3



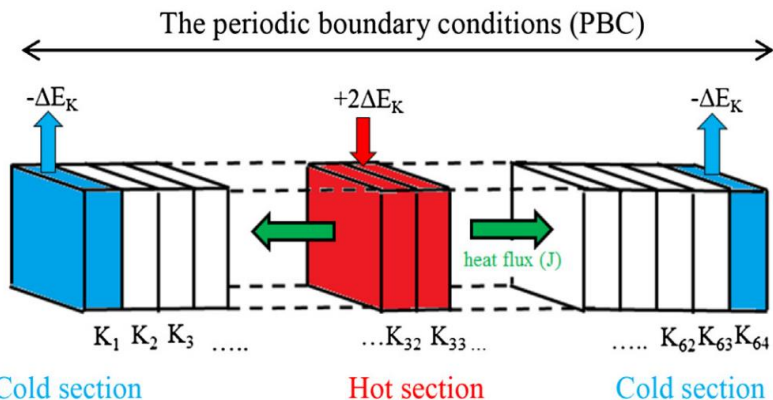
CATSAMs 体系中羧基的不同的相互作用

CATSAM\_X (X = 0, 1 和 3) 在羰基伸缩区域的频率分布: a, c, e 是  $\nu(\text{C}=\text{O})$  的频率分布; b, d, f 是在空气以及 pH = 2.2 和 5.1 条件下 ATR-FTIR 的实验谱图

Table 1. Average CATSAM Structural Features from the Last 200 Frames of the MD Simulations

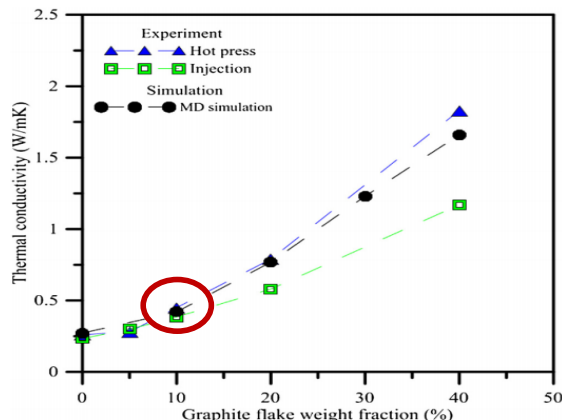
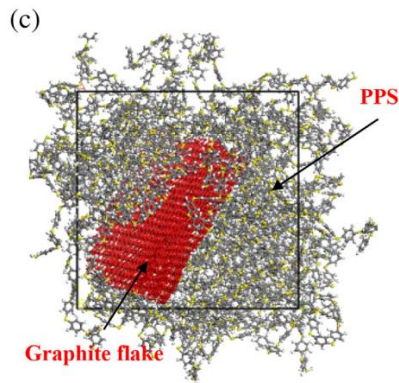
model system	average film thickness (Å)	average tilt angle ( $\theta$ )
CATSAM_0 (100% prot in vacuum)	21.1 ± 0.1	16.0 ± 1.0
CATSAM_1 (100% prot + water)	21.1 ± 0.2	19.4 ± 1.4
CATSAM_2 (75% prot + water)	21.0 ± 0.1	19.6 ± 0.8
CATSAM_3 (50% prot + water)	21.1 ± 0.1	17.0 ± 0.6
CATSAM_4 (25% prot + water)	20.9 ± 0.1	17.9 ± 0.7
CATSAM_5 (0% prot + water)	20.7 ± 0.1	21.1 ± 0.8

## 基于非平衡动力学模拟和实验研究石墨片/聚苯硫醚复合材料热导性能



非平衡动力学模拟模型示意图

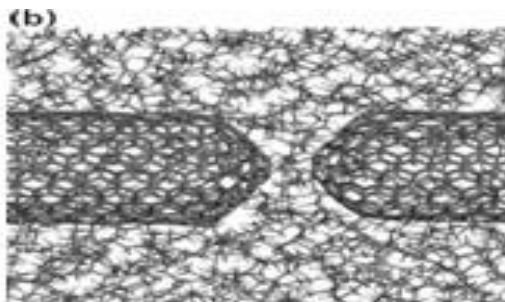
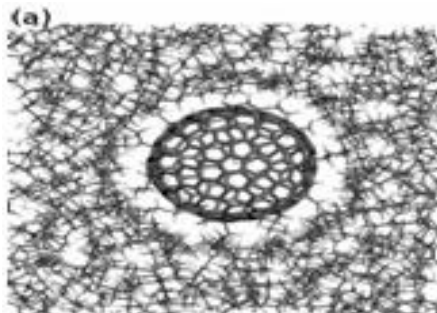
NEMD将整个体系沿着z轴方向分成64份，其中K1和K64是冷区，热量从此区域移除；K32和K33是热区，热量从此区域注入。通过调整原子速度来实现冷区、热区的热量调整，使粒子具有所需要的动能。同时在体系中产生热通量



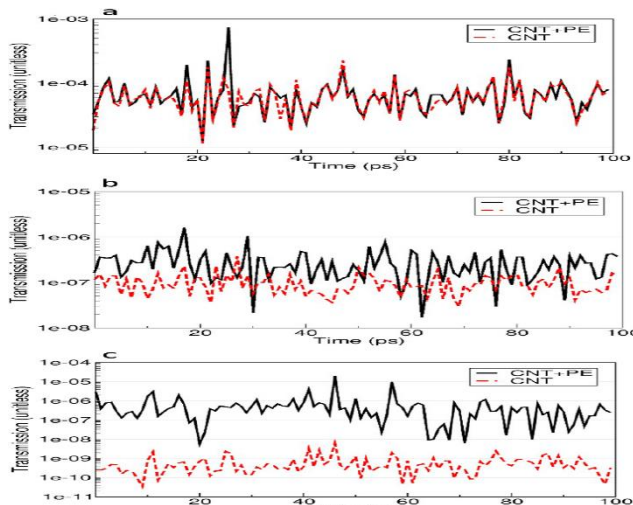
### 模拟结果：

- 在5 wt%石墨添加的情况下热导相对纯PPS没有显著提升。
- 随着石墨的添加量超过10wt%，热导率的提高随着石墨的添加量增大而变大。

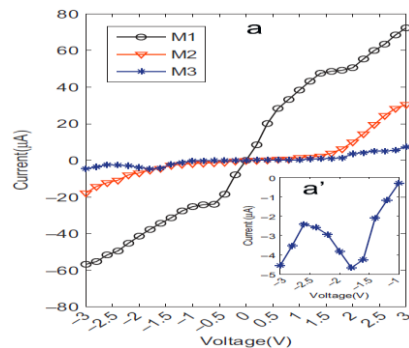
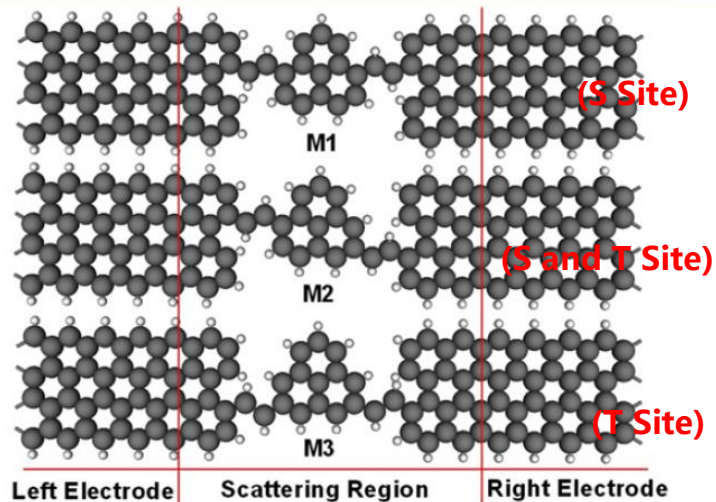
## 碳纳米管-聚乙烯交界处电荷传输的原子模型



三种不同顶端距离构型的透射系数随时间的变化：(a)3Å, (b)5Å, (c)6 Å。



PE已经部分渗透到CNT的结合处，对于电子的输送有一定贡献。



Physica B, 407 (2012) 3861-3864

图、CNT结合的侧面(a)及正面(b)，由(10,10) SWCNT嵌入无定型聚乙烯模型中构成。

# CASTEP平面波赝势法(Planewave-Pseudopotential)

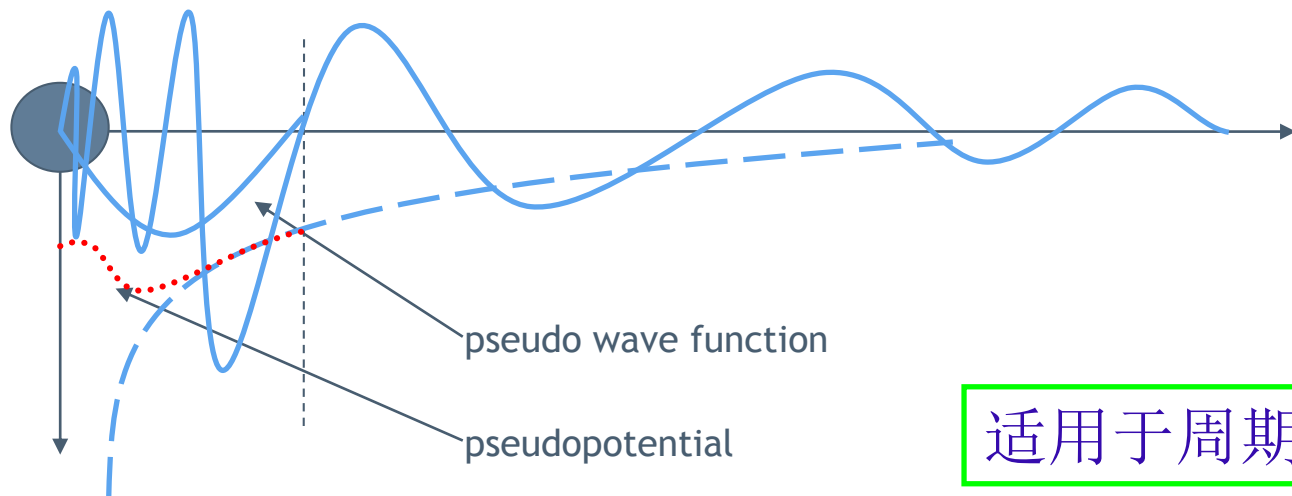
CASTEP将电子波函数通过  
平面波函数展开

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{i,\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}$$

赝势



有效的减少平面波数目



适用于周期性体系

# CASTEP 是领先的固态DFT程序

- 使用平面波赝势
- 由Cambridge大学Mike Payne教授发布
- 每年发表的数百篇论文

其研究领域包括：

- 晶体材料结构优化及性质研究（半导体、陶瓷、金属、分子筛等）
- 点缺陷性质（如空位、间隙或取代掺杂）、扩展缺陷（晶体晶界、位错）
- 表面和表面重构的性质、表面化学
- 电子结构（能带、态密度、声子谱、电荷密度、差分电荷密度及轨道波函分析等）
- 晶体光学性质
- 磁性材料研究
- 材料力学性质研究
- 材料逸出功及电离能计算
- STM图像模拟
- 红外/拉曼光谱模拟; 声子谱以及声子态密度；
- 反应过渡态计算
- 动力学方法研究扩散路径



# DMol<sup>3</sup>: 原子轨道线形组合法(LCAO)

$$\psi_i = \sum_{\alpha} \sum_j c_{ij}^{\alpha} \phi_j^{\alpha}(r_{\alpha})$$

$$\phi_j^{\alpha}(r_{\alpha}) = \sum_{lm} \underbrace{R_{nl}^{\alpha}(r)}_{\text{Radial portion}} \underbrace{Y_{lm}(\vartheta, \varphi)}_{\text{Angular Portion}}$$

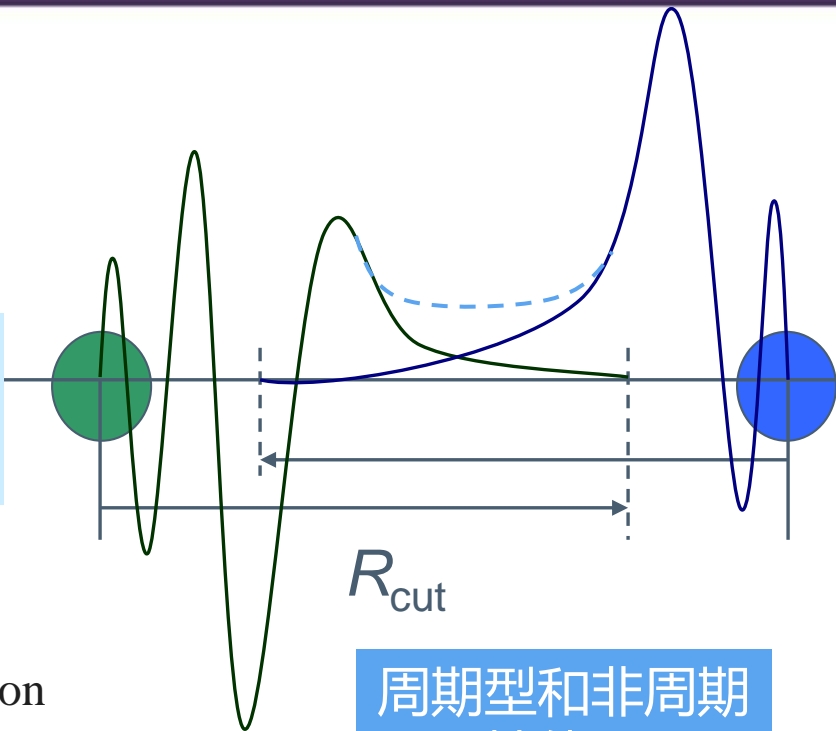
Radial portion

atomic DFT eqs. numerically

Angular Portion

适合于分子、团簇、分子筛、分子晶体、聚合物等“开放类结构”

Tips: 对于空体积较大的晶体, 使用DMol<sup>3</sup>的效率要高于Castep



周期型和非周期  
性体系

- 第一个商业化DFT程序
- 使用高效、紧凑的数值轨道基组
- 能够处理周期性和非周期性结构

## 研究领域

电子结构的解析

反应过渡态，中间态的搜索，反应动力学计算

基于全部或部分Hessian矩阵的振动频率计算

Mulliken，Hirshfeld以及ESP电荷的计算，键级分析，电极矩计算

生成热，自由能，熵，热容以及ZPVE的计算

支持溶剂化模型COSMO

Fukui函数的计算

非线性光学性质以及紫外可见光谱

电子输运性质计算