

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

Solutions for Innovation.
信息化建设领导者

目录 / CONTENTS

Materials Studio 模块介绍	02
• Visualizer 视窗界面	02
■ 量子力学方法	02
• CASTEP 平面波赝势方法	03
• DMol ³ 原子轨道线性组方法	04
• QMERA 量子力学 / 分子力学杂化方法	05
• ONETEP 线性标度方法	05
• DFTB+ 紧束缚近似方法	06
• VAMP 原子轨道线性组方法	07
• Cantera 化学反应动力学方法	07
■ 经典模拟方法	08
• COMPASS II 高精度力场	08
• Forcite Plus 包含各种通用力场	09
• GULP 包含各种针对无机体系的专用力场	10
• Amorphous Cell 无定形模型搭建工具	11
• Adsorption Locator 吸附位、吸附构象搜索	11
• Blends 混合体系相容性研究	12
• Conformers 聚合物构象研究	12
• Sorption 吸附位、吸附等温线计算	13
• Synthia 基团贡献法预测聚合物性能	13
■ 介观模拟方法	14
• Mesocite 耗散粒子动力学、粗粒化分子动力学	14
• MesoDyn 平均场密度泛函方法	15
■ 晶体、结晶与仪器分析方法	16
• Polymorph Predictor 基于力场找到分子的稳定堆积	16
• X 射线、中子、电子衍射谱解析工具包	17
• Morphology 预测晶粒形貌	18
■ 定量构效关系分析 QSAR	19
Materials Studio 中的 Perl 脚本	21
Materials Studio 与 Pipeline Pilot 的结合	21
Materials Studio 的硬件需求	22

Materials Studio 是多尺度多功能分子模拟软件平台。它不仅拥有优异的操作界面，快捷实现模型搭建、参数设定以及结果的可视化分析，而且融合多种模拟方法，整合多达 23 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。历经 18 年的发展，Materials Studio 变得更加完善，更加灵活，多种应用程序接口以及脚本编写功能的添加使其能够更好的满足各类用户的研究需求。其所拥有的超过 500 家用户涵盖材料、物理、化学、化工等多个领域，相关的研究工作在各类权威期刊上发表论文近两万篇。

Materials Studio 模块介绍

• Visualizer

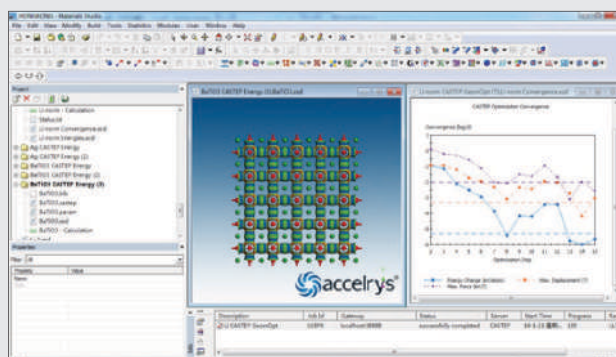
Materials visualizer 是 Materials Studio 的图形化界面，也是整个平台的核心。

Visualizer 的功能包括：

- 搭建、调整各类三维可视的结构模型，包括晶体、小分子、聚合物、纳米材料、团簇、表界面、各种缺陷结构以及电极模型^{7,0}；结合 perl 脚本，枚举合金和空位结构^{8,0}；
- 提供模块参数设置、结果分析的视窗界面；提供结构文件、参数文件以及结果文件的管理界面；提供计算进程的监控界面；
- 对模拟结果进行各种分析，可与结构模型相结合进行数据的二维、三维显示，可以给出数据的图表，可以对特定的结果进行动画演示或给出矢量图；

Visualizer 的特性包括：

- 支持多种结构、图形、文本文件格式的输入和输出；
- 支持不同功能模块间结构数据的共享；
- 提供 Perl 语言环境，以及脚本编写；
- 提供不规则多面体表面积、体积的计算工具。



■ 量子力学方法

量子力学方法 (Quantum Mechanics) 是一种能够对材料体系电子结构特点进行研究的方法，精度高且几乎不依赖于任何经验参数，因此被广泛应用在各类材料的模拟研究中。

半经验量子力学方法 (Semi-empirical Quantum Mechanics) 同样能够对材料体系电子结构特点进行研究，但是包含有更多的经验参数以及数学、物理近似，因此，计算效率相比于纯粹的量子力学更高，但是精度会略低。

量子力学以及半经验量子力学方法均以定态薛定谔方程为核心，计算原子核满足特定排列、堆积时，核外电子的空间、能量分布，并由此进一步得到体系的电学性质、磁学性质、光学性质、热力学性质、力学性质，所能研究的材料体系类型包括：各类晶体材料及可能的各种缺陷结构，各种维度的纳米材料，各种分子及团簇材料。

量子力学方法最多能够计算数百原子模型的相关性质，而半经验量子力学方法能够计算数千原子的模型。

Materials Studio 中的量子力学模块：

- CASTEP(平面波赝势方法)；
- DMol³(原子轨道线性组方法)；
- QMERA(量子力学/分子力学杂化方法)；
- ONETEP(线性标度方法)

Materials Studio 中的半经验量子力学模块：

- DFTB+(紧束缚近似方法)；
- VAMP(原子轨道线性组方法)

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

• CASTEP

CASTEP 是由剑桥凝聚态理论研究所开发的一款基于密度泛函理论的先进量子力学程序。程序采用平面波函数描述价电子，利用赝势替代内层电子，因此也被称为平面波赝势方法。适于解决固体物理，材料科学、化学以及化工等领域中的各类问题。目前，CASTEP 已经在材料研究的诸多领域获得了广泛而成功的应用，每年都有数百篇文章在各类顶级学术刊物上发表。所涉及的研究对象包括半导体、陶瓷、金属、分子筛等各类晶体材料，以及掺杂、位错、界面、表面等各种缺陷结构。

CASTEP 的主要功能：

结构优化

优化原子坐标和晶胞参数，支持原子分数坐标、晶胞参数、键长、键角、二面角限定，支持外加应力，支持指定激发态下分子结构的优化 (TD-DFT)^{7.0}，支持对含有晶胞参数固定的结构使用 TPSD 结构优化算法²⁰¹⁶，支持固定体积优化^{2017 R2}，晶胞形状固定的结构优化²⁰¹⁸

过渡态和反应速率

过渡态搜索 (Synchronous Transit 方法)，过渡态确认^{7.0}，固体表面反应的反应速率及和温度相关的速率常数^{8.0}

电子结构解析

能带结构，电子态密度 (局域态密度、分波态密度)，电荷密度，差分电荷密度，电子局域函数^{4.4}，电子激发能 (TD-DFT)^{7.0}，电子轨道，扫描隧道显微镜 (STM) 图像模拟，共价键级，静电荷 (Mulliken、Hirshfeld)，静电势，功函数^{4.4}，自旋磁矩，费米面^{5.5}，求解单个轨道的布居数²⁰¹⁸

介电性质

波恩有效电荷，静态介电常数张量，极化率张量

力学性质计算

弹性力常数张量，体模量，剪切模量，杨氏模量，泊松比，硬度^{2017 R2}，德拜温度，声速²⁰¹⁶

热力学性质计算

声子态密度、色散谱 (Linear response 的方法扩展至金属体系^{6.0})；熵，焓，自由能，零点能，德拜温度，等容热容随温度的变化曲线，各向异性温度因子 (热参数)²⁰¹⁶

光学性质计算

红外光谱，拉曼光谱^{5.0} (计算指定频率范围的拉曼活性模强度^{6.1})，核磁共振谱⁹ (化学位移、J-coupling 常数、电场梯度张量)，电子顺磁共振 EPR 的 g-tensor^{2017 R2}，电子能量损失谱^{4.4} (旋轨耦合效应^{5.5})，X 射线发射谱^{4.4}，X 射线吸收近边结构谱^{4.4} (旋轨耦合效应^{5.5})，光频介电常数虚 (实) 部，吸收系数，折射率，光导率虚 (实) 部，能量损失函数，基于 Time-Dependent DFT (TD-DFT) 理论计算分子和固体的光吸收谱^{8.0, 2016}

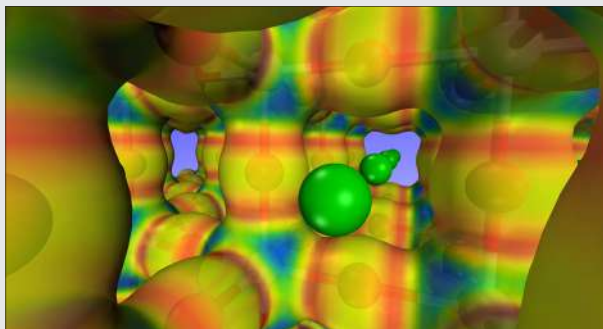
动力学计算^b

支持 NVE, NVT, NPT 以及 NPH 等系综，以及多种控温控压函数，基于当前原子速度进行动力学计算^{2017 R2}

^a 需要 CASTEP NMR 模块的支持；^b 结果分析采用 Forcite Plus 的分析工具，具体内容参考 Forcite Plus 介绍 (09 页)

CASTEP 的主要特性：

- 定制交换相关泛函^{2017 R2}
- 范德瓦尔斯相互作用修正^{5.5} (增加适用元素类型^{6.0}，允许添加新的元素，并对各元素的参数进行编辑^{7.0})
- 支持旋轨耦合 (spin-orbital coupling)²⁰¹⁶
- 表面模型计算所需的偶极修正^{6.1}
- Hubbard U 修正 (可用于结构优化^{5.5}，声子计算^{6.0}，弹性常数^{2017 R2})
- 自带赝势生成程序 (可生成包含或者不包含相对论效应的超软和模守恒赝势²⁰¹⁶)
- 自动、手动选择最有效的并行方式 (k/G/k+G)
- 多种自洽收敛算法：Density mixing 和 EDFT
- 混合交换关联函数：sX-LDA、HF-LDA、PBE0^{4.4}、B3LYP^{4.4}、HSE03 和 HSE06^{6.1}
- 支持 Perl 脚本^{5.0}
- 支持断点续算
- 自动选择最佳的 CPU 数目^{5.5}
- 支持外加电场^{7.0}
- 支持含时密度泛函 (TD-DFT) 方法
- 支持扩展的拉格朗日波恩 - 奥本海默分子动力学 (XL-BOMD)^{8.0}



• DMol³

DMol³ 是由 Bernard Delley 教授发布的一款基于密度泛函理论的先进量子力学程序，它采用原子轨道线性组合的方法描述体系的电子状态，因此也被称为原子轨道线性组合法。DMol³ 有别于其它方法的最重要特点是采用数值函数描述原子轨道，这一做法兼顾了计算精度和效率，使得 DMol³ 成为一款高效实用的量子力学程序。除了可以预测材料的电子学、光学、热力学性能外，它还能够细致地研究气相、溶液、表面及其它固态环境中的化学反应，适合解决化学、化工、生物、材料、物理等领域中的各类问题，尤其是化学反应机理及催化剂设计的问题。每年都有数百篇应用 DMol³ 的文章在各类顶级学术刊物上发表。研究对象涉及晶体材料、有机分子、团簇、纳米和多孔材料、生物分子等各种周期性及非周期性体系。

DMol³ 的主要功能：

结构优化

优化原子坐标和晶胞参数，支持原子笛卡尔坐标（可限定某个方向坐标）、键长、键角、二面角限定，优化指定激发态的结构，得到激发能和发射能以及光吸收谱

力学性质计算^{7.0}

弹性力常数张量，体模量，剪切模量，杨氏模量，泊松比，硬度^{2017 R2}，德拜温度，平均声速²⁰¹⁶

过渡态和反应速率

过渡态搜索 (Synchronous Transit 方法)，过渡态优化，过渡态确认，气相、液相和固体表面反应的反应速率及和温度相关的速率常数^{8.0}

电子结构解析

能带结构，电子态密度（局域态密度、分波态密度），电荷密度，差分电荷密度，电子轨道，Fukui 函数（支持周期性体系^{5.5}），共价键级（非周期性体系），静电荷 (Mulliken、Hirshfeld、ESP)，静电势，功函数^{4.4}，偶极矩，核电场梯度，费米面^{5.5}，自旋磁矩

热力学性质计算

熵，焓，自由能，零点能，等压热容随温度的变化曲线

光学性质计算

红外光谱，拉曼光谱^{6.0}（计算非周期性体系时给出强度），紫外可见光谱^{5.5} (TD-DFT，计算非周期性体系时给出强度)，非线性光学性质^{5.5} (TD-DFT，非周期性体系) { 频率依赖线性极化率、次谐波振荡 (SHG)、光整流效应 (OR)、普克尔斯电光效应 (EOPE)、三次谐波振荡 (THG)、直流电诱导二次谐波振荡 (dc-SHG)、强度依赖折射率 (IDRI)、克尔电光效应 (EOKE) }

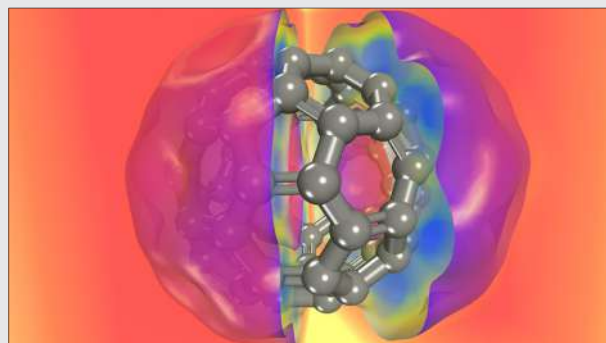
动力学计算^a

支持 NVE 和 NVT，以及多种控温函数

^a结果分析采用 Forcite Plus 的分析工具，具体内容参考 Forcite Plus 介绍 (09 页)

输运性质计算^{8.0}

基于非平衡格林函数法 (NEGF) 计算电子输运性质



DMol³ 的主要特性：

- 范德瓦尔斯相互作用修正^{5.5} (增加适用元素类型^{6.0}，允许添加新的元素，并对各元素的参数进行编辑^{7.0})
- 表面模型计算所需的偶极修正^{6.0}
- 基组重叠误差 (BSSE) 修正^{6.0} (非周期性体系)，并可单独指定子体系的自旋多重度和所带电荷^{2017 R2}
- 支持 COSMO 以及 COSMO-RS (CONductor like Screening Model for Realistic Solvents) 溶剂化模型，可用于计算蒸汽压、分压系数以及水化自由能，支持 COSMO 模型溶剂界面的显示^{7.0}
- 支持电荷密度预调节 (Charge density pre-conditioner) 方法，增加计算收敛性^{7.0}
- 混合交换关联函数 B3LYP^{6.0} (适用于非周期性体系)
- 支持 Meta-GGA (M06L、M11L、MS0、MS1、MS2、revTPSS、TPSS)^{8.0,2016}; PBE sol^{8.0}，Hartree-Fock^{2017 R2}
- 支持 Perl 脚本
- 支持含时密度泛函 (TD-DFT) 理论
- 高精度数值轨道基组：TNP^{4.4}、DNP^{+6.1}
- 支持全电子计算，可考虑相对论效应
- 频率计算支持粗粒化的并行计算方式^{5.0}
- 允许外加电场
- 支持周期性以及非周期性边界条件
- 支持断点续算
- 支持对内存和硬盘访问的控制^{7.0}

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

• QMERA

QMERA 是一款将量子力学方法的精确性与经典模拟方法的高效性有机结合的程序，也被称为量子力学 (Quantum Mechanics) 与分子力学 (Molecular Mechanics) 的杂化方法。在利用 QMERA 进行模拟计算的过程中，需要在所研究体系中划分出量子力学和分子力学区域 (其中量子力学区域往往是研究中的核心和兴趣所在，譬如非均相催化中的活性位点区域)，然后分别调用量子力学方法中的 DMol³ 模块和经典模拟方法中的 GULP 模块进行处理。QMERA 提供了多种方式解决两个区域间的耦合问题。它可研究包含上千个原子的体系，在充分考虑周围原子影响的条件下，得到其核心部分的电子结构、可能的化学反应机理、紫外可见光谱、红外光谱等信息。这一方法在非均相催化、表界面吸附、聚合物间的相互作用、生物分子活性的研究中相比于传统量化方法更具优势。

QMERA 的主要功能：

结构优化

优化原子坐标，支持原子笛卡尔坐标、键长、键角、二面角限定

过渡态

过渡态搜索^{5.5} (Nudged Elastic Band 方法)，过渡态优化^{5.5}

电子结构解析

电荷密度，差分电荷密度，电子轨道，Fukui 函数，共价键级，静电荷 (Mulliken、Hirshfeld、ESP)，静电势，偶极矩，核电场梯度，自旋磁矩

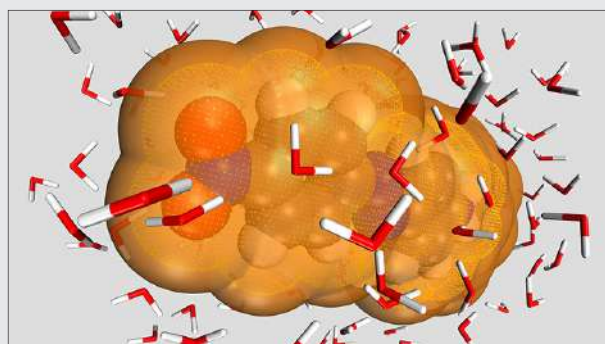
光学性质计算

振动光谱 (简正模频率)，紫外可见光谱^{6.0}

动力学计算^{6.0a}

支持 NVE 和 NVT，以及多种控温函数

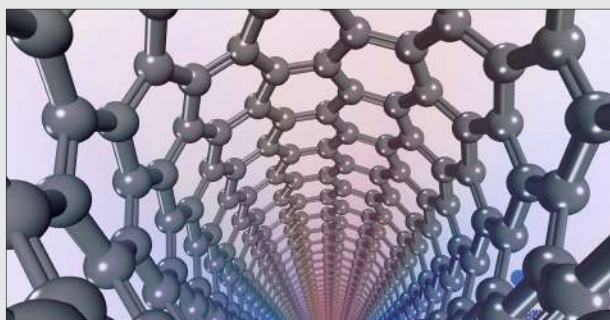
⁹ 结果分析采用 Forcite Plus 的分析工具，具体内容参考 Forcite Plus 介绍 (09 页)



QMERA 的主要特性：

- 范德瓦尔斯相互作用修正 (Grimme)^{5.5}
- 支持周期性 (整个体系^{5.0} 或者量子力学区域^{5.5}) 以及非周期性边界条件
- 支持部分原子振动频率计算 (Partial Hessian)
- 混合交换关联函数 B3LYP^{6.0}；Meta-GGA (M06L、M11L)；PBE sol^{8.0}
- 支持 Universal 和 Dreiding 力场，支持力场的拟合和编辑
- 支持加法和减法 (Additive & Subtractive QM/MM) 两种方式计算体系能量
- 支持 Mechanical 和 Electronic 两种耦合方式，后者可以考虑分子力学区域对量子力学区域的极化作用
- 包含多种专用力场，譬如专门用于硅铝多孔材料的 Sauer 力场^{5.5}
- 量化区域边界的悬键采用 H 原子饱和

• ONETEP



ONETEP 是由剑桥凝聚态理论研究组开发的一款专门针对大体系 (>500 原子) 研究的量子力学程序。其关键技术是采用非正交的广义万尼尔 (Wannier) 函数替代平面波函数进行计算，并采用 FFT box 技术和处理电荷密度的 Density kernel 稀疏矩阵方法，使模拟计算的时间与体系的大小成线性关系。因此，ONETEP 也被称为线性标度的量子力学方法。其应用范围主要包括表面化学、大分子体系 (蛋白质、DNA、抗体) 及其它复合材料、纳米材料以及半导体、陶瓷材料缺陷等。

ONETEP 的主要功能：

结构优化

优化原子坐标，支持原子笛卡尔坐标限定

过渡态

过渡态搜索 (Synchronous Transit 方法)

电子结构解析

电子态密度，电荷密度，电子轨道，共价键级，静电荷 (Mulliken)，静电势，自旋磁矩

光学性质计算^{7.0}

光频介电常数虚部

• DFTB+

DFTB+ 是一款融合了密度泛函方法 (DFT) 准确性和紧束缚方法 (TB) 高效性的半经验量子力学程序，其中所采用的原子轨道波函数和原子核间相互作用势均基于 DMol³ 的结果拟合得到。DFTB+ 可以对数千个原子体系进行模拟研究，为解决电子、催化、化工等领域中各种复杂体系及复杂过程的相关问题提供一种新的模拟方法。对于传统量化模块遇到的，如反应动力学过程等需要花费研究者大量时间和计算资源的问题，DFTB+ 有其独有的优势。所涉及的研究对象包括有机分子、团簇、绝缘体、半导体、金属，甚至是生物大分子等各类非周期性和周期性体系。

DFTB+ 的主要功能：

结构优化

优化原子坐标和晶胞参数，支持原子分数坐标、笛卡尔坐标、晶胞参数的限定，支持外加应力 (等静压)

力学性质计算^{2017 R2}

弹性常数张量、体模量、剪切模量、杨氏模量、泊松比、平均声速

动力学计算^a

支持 NVE, NVT, NPT 以及 NPH 等系综，以及多种控温控压函数，包括 Souza-Martins 控压函数，实现各向异性加压^{7.0}

参数化工具

基于 DMol³ 进行参数化；提供方便的参数化界面和工具；允许在已有的 Slater-Koster 参数库中添加新的元素和参数^{6.1}；设置用于参数拟合的体系的电荷²⁰¹⁶

电子结构解析

能带结构，电子态密度 (局域态密度、分波态密度^{7.0})，电荷密度，差分电荷密度，电子轨道，静电荷 (Mulliken)，费米面

^a 结果分析采用 Forcite Plus 的分析工具，具体内容参考 Forcite Plus 介绍 (09 页)

动力学计算²⁰¹⁶

周期性结构，NVT 和 NVE 系综

ONETEP 的主要特性：

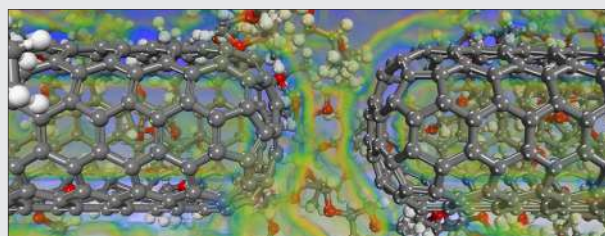
- Hubbard U 修正^{6.0}
- 范德瓦尔斯相互作用修正^{6.0}
- 支持外加电场^{6.0}
- 支持多种交换关联函数：BLYP 和 XLYP^{6.0}，支持包含色散修正的交换关联函数^{7.0}：VDW-DF, VDW-DF2, optPBE, optB88, VDW-DFK
- 支持隐性溶剂化模型的使用^{2017 R2}

电子输运性能计算^{7.0}

透射函数，伏安特性曲线

振动频率计算^{7.0}

所有简正模频率以及部分简正模频率计算



DFTB+ 的主要特性：

- 包含多种已知参数库：CH、CHNO、SiGeH、mio、pbc、hyb、chalc、trans3d、tiorg、znorg、borg、matsci、3ob、HalOrg、Rare、Au-Org、siband、magsil、3ob-freq 可添加新的参数库
- 范德瓦尔斯相互作用修正
- 支持 Perl 脚本
- 支持电荷自洽 (Self-Consistent Charge) 计算，以及多种自洽算法
- 支持周期性以及非周期性边界条件
- 支持对体系设置非整数自旋^{2017 R2}

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

• VAMP

VAMP 是一款基于原子轨道线性组合方法的半经验量子力学程序。它通过忽略部分不太重要的原子轨道重叠积分或者用经验参数（基于实验数据拟合得到）替代部分轨道重叠积分的方式简化计算。具体的方式包括 NDDO 和 ZINDO，以及在两者基础上演化而来的 MNDO、MNDO/C、MNDO/d、AM1、AM1^{15.0}、PM3、PM6^{4.4}、CNDO 以及 INDO。各种方式在简化的积分类型、适用的元素范围、适用的性质计算上都有一定的区别，可根据需要进行选择。VAMP 主要是对有机和无机分子体系进行模拟计算，它可以快速计算分子的各种物理和化学性质。

VAMP 的主要功能：

结构优化

优化原子坐标

过渡态

过渡态搜索 (McIver-Kormonicki)，过渡态优化

电子结构解析

电荷密度，原子、分子极化率以及极化张量，分子轨道，定域轨道，静电荷 (Coulson、Mulliken 和 ESP)，共价键级，静电势

光学性质

红外光谱，拉曼光谱，紫外可见光谱，¹³C 化学位移，电子自旋共振谱 (ESR) 中 H 超精细耦合常数

热力学性质

生成热，零点振动能，熵、焓、热容随温度的变化曲线

VAMP 的主要特性：

- 支持 COSMO 和 SCRF(Self-Consistent Reaction Field) 两种溶剂化模型
- 支持用于激发态研究的 CI(Configuration Interaction) 方法
- 支持 Perl 脚本^{5.5}
- 仅支持非周期性边界条件
- 支持 NAO-PC(Natural Atomic Orbital-Point Charge) 模型进行分子静电性能的计算

• Cantera

Cantera 是一款高速求解化学反应动力学的软件，程序基于求解化学反应速率方程，通过给定反应混合物的起始组分，可以预测产物混合物的组分。Cantera 适应多种类型体系的研究，包括研究均匀体系如搅拌均匀的反应容器；反应网络 (networks of reactors) 以及一维的非均匀体系如火焰等。目前 Cantera 已经应用于包括燃烧如航天发动机燃烧室反应；煤燃烧污染物排放技术相关设计；石油化工中的裂解反应过程；核工业中氦气混合气在安全壳内的缓慢扩散燃烧设计；固定式燃气轮机和内燃机中的燃烧进程；爆炸反应；酿造、抗生素和柴油生产中推测产物和操作条件等诸多的化学反应领域中。

Cantera 的主要功能：

平衡态计算

计算混合体系的平衡状态，在计算任务执行前输入混合组分的比例以及反应的温度和压力，得到热力学平衡状态及终产物的组成，支持纯气体以及固体表面气相反应模拟

一维层流预混火焰模拟

模拟层流预混自由传播火焰前缘结构，包括反应燃烧区和自由蔓延区。输入反应混合物组分比例以及反应温度和压力，得到随轴向位置变化的反应物产物浓度分布规律、火焰传播的速度、管径温度分布等

连续搅拌反应釜反应模拟

设定的混合物的组分比例，并假设各组分气体在空间分布是均匀的，得到组分浓度随反应时间和进程的变化、点火时间等

平推流 / 活塞流反应器模拟

在计算任务执行前指定反应器中气体混合物比例以及发生反应的表面，反应温度和压力。通过反应器的气体沿反应器轴向移动，反应器被划分为一系列连接的活塞片段，每个片段部分具有均一的气相和表面组成，在进入下一个活塞片段前达到了稳定态。最终得到沿反应器轴向位置变化的每个气体物种的浓度变化以及每个物种的表面覆盖度的变化。支持纯气体以及固体表面气相反应模拟

Cantera 的主要特性：

- Cantera 自带的 Reaction Editor 功能允许用户自定义全新的或者编辑已有的化学反应机理表格
- 支持直接调用 DMol3 模块计算未知反应的热力学参数和速率参数，进而完备反应机理表格

- 高效快速处理多组分多步的复杂反应
- 支持脚本编辑功能，自定义软件功能
- 支持直接调用 Visualizer 面板的后处理工具得到详细的结果信息图表

■ 经典模拟方法

经典模拟方法无法准确描述体系的电子结构，它以各类力场（势函数）表征原子、离子及分子间相互作用，其中包含有大量基于实验数据或者量子力学方法的经验参数，所以，经典模拟方法具有非常高的效率，能够计算数千至数十万原子模型的相关性质，而计算精度则取决于势函数及参数的适用性。

经典模拟方法被仅用于描述体系某个定态的各类性质时，称为分子力学方法 (Molecular Mechanics)；当与牛顿运动方程相结合，描述原子核在特定热力学条件下的运动时，称为分子动力学方法 (Molecular Dynamics)。分子的可混性、内聚能、润湿性、力学性质、扩散及阻隔、表面及孔道吸附、各种相关函数以及性质的统计平均值均可基于分子力学、动力学结果获得。当然，也可以把这种描述微观粒子间相互作用的方法与蒙特卡洛 (Monte Carlo) 方法相结合，构建无定形模型、研究分子的构象或者搜寻可能的吸附位点。

Materials Studio 中包含多种力场，并允许使用者根据需要调整函数形式、编辑或拟合相关参数，所能够研究的材料体系类型包括：聚合物、有机小分子，金属单质、合金、金属氧化物，碳、硅纳米材料，硅铝多孔材料，铀、镎、钚的混合氧化物，粘土矿物等。

Materials Studio 中的分子力学、动力学模块：

COMPASS II(高精度力场)；
Forcite Plus(包含各种通用力场)；
GULP(包含各种针对无机体系的专用力场)

Materials Studio 中的定量结构 - 性能关系模块：

Synthia

Materials Studio 中涉及蒙特卡洛方法的模块：

Amorphous Cell(无定形模型搭建)；
Adsorption Locator(吸附位、吸附构象)；
Blends(混合体系相容性)；
Conformers(聚合物构象)；
Sorption(吸附位、吸附等温线)；

• COMPASS II^{7.0}

COMPASS 是一个功能强大的、基于量子力学方法，并且能够对凝聚态体系进行原子尺度模拟研究的力场。对其参数有效性的考察，不仅包括了单分子（气态）的量子力学计算结果以及实验结果，还充分考虑了其凝聚态性能。因此，COMPASS 可在一个很大的温度、压力范围内，精确地预测多种单分子及其凝聚态的结构、构象、振动及热物理性质。Materials Studio 7.0 在此基础上推出了 COMPASS II，添加对离子液体的支持，强化对聚合物和杂环体系的计算精度，包含的力场类型增加到 253 个 (COMPASS 229 个)，参数及函数项增加到 8294 个 (COMPASS 3856 个)。Materials Studio 8.0 修正 COMPASS II 部分力场参数，提高叠氮化物 (Azides)、SF₆、磺酰胺类 (Sulfonamides) 和肟类 (Oximes) 的计算精度。

COMPASS 的主要特性：

- 参数均基于高精度的量子力学计算，并优化以实现和实验数据的良好一致性
- 可准确预测的性质包括：分子结构，振动频率，偶极矩，液相结构，晶体结构，晶格能，弹性力常数等；基于动力学模拟，可以准确预测内聚能密度，体系状态方程
- 可以在 Amorphous Cell、Forcite Plus、Blends、Conformers、Sorption 以及 Adsorption Locator 模块中使用
- 可研究的体系涵盖了所有常见的无机、有机小分子，高分子，部分金属 (Al, Na, Pt, Pd, Au, Ag, Sn, K, Li, Mo, Fe, W, Ni, Cr, Cu, Pb, Mg)，金属氧化物 (Li₂O, Na₂O, K₂O, MgO, CaO, SrO, BaO, TiO₂, Fe₂O₃, Al₂O₃, SnO₂, SiO₂) 以及卤化物 Li⁺, Na⁺, K⁺, Rb⁺, Cs⁺, Mg²⁺, Ca²⁺, Fe²⁺, Cu²⁺, Zn²⁺, F⁻, Cl⁻, Br⁻, I⁻)，沸石 (xAl₂O₃·ySiO₂)

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

• Forcite Plus

Forcite Plus 是一款分子力学和分子动力学模拟程序。它可以对分子、表面或三维周期性材料体系进行快速的能量计算、几何优化以及各种系综下的动力学模拟研究，可以分析材料体系的各种结构参数、热力学性质、力学性质、动力学性质以及统计学性质。主要应用于有机、无机小分子、有机金属络合物、高分子聚合物、纳米及多孔材料、部分金属、金属氧化物晶体及晶体表面界面结构的研究。

Forcite Plus 的主要功能：

结构优化

优化原子坐标和晶胞参数，支持原子笛卡尔坐标和晶胞参数的限定，可以添加外应力（等静压）

模拟淬火

将动力学模拟和结构优化相结合，辅助扫描势能面，寻找最优的分子构象、吸附构象等

模拟退火

基于不同温度点的动力学模拟，实现体系的反复升、降温过程，辅助扫描势能面，寻找最优的分子构象、吸附构象等

动力学计算^a

基于牛顿运动方程，研究原子核在特定系综 (NVE、NVT、NPT、NPH) 条件下的运动，可分析得到如下性质：

- 与结构相关的性质
键长、键角、扭转角时间分布曲线^{6.1}，浓度分布曲线，密度场^{5.5}，径向分布函数（配位数），回转半径的几率分布（描述聚合物尺寸），中子或 X 射线散射，空间取向相关函数
- 动力学相关性性质
沿一定方向的平均速度、温度分布曲线，均方根位移（扩散系数），偶极自相关函数（红外光谱），应力自相关函数（剪切、体粘度），系综涨落性质（热力学性质），距离指向的转动相关函数（介电弛豫，NMR 的偶极弛豫），位移时间相关函数，速度自相关函数（扩散系数）
- 统计学相关性性质
哈密顿量随模拟时间的变化，动能、势能及其组成随时间变化曲线，压力、温度分布曲线，晶格参数、密度分布曲线
- 其它
采用 Study Table^b 列出轨迹详细数据

剪切模拟^{6.0}

基于非平衡动力学，做剪切模拟，控制剪切方向和速度，得到剪切粘度、应力张量

限制剪切模拟^{5.5}

做流体在两个平板间的剪切模拟，得到垂直于剪切方向上的速度、温度分布，以及温度和壁压力随时间的变化

力学性质计算

基于动力学轨迹文件^c 计算体系力学性质：弹性力常数、体模量、剪切模量、杨氏模量、泊松比、声速、拉梅常数
力学性质计算方法：恒应变法 (Constant Strain)、静态方法（使用 Hessian）和应力涨落的方法 (Stress fluctuation)

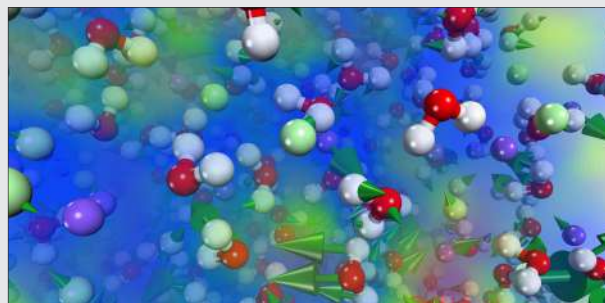
内聚能密度

基于动力学轨迹文件计算体系内聚能密度，溶解度因子

溶解自由能的计算^{7.0}

计算分子在各种溶剂和聚合物中的溶解自由能

^a CASTEP、DMol³、QMERA、DFTB+、GULP 的动力学结果均采用 Forcite Plus 的分析工具进行分析；^b Materials Studio 支持的一种特殊的表格文件，可在表格中直接保存三维结构数据；^c Materials Studio 动力学模拟的结果文件



Forcite Plus 的主要特性：

- 支持 Perl 脚本扩展模拟和分析功能，譬如非平衡动力学方法计算热导率，计算应力应变曲线^{7.0}，控制轨迹文件的输出^{6.0}
- 支持外加电场^{5.5}
- 支持设定各原子受力^{7.0}
- 支持 EAM²⁰¹⁸、Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 力场
- 允许编辑 Dreiding、PCFF^{6.0}、CVFF^{6.0} 力场，并提供新的函数形式自定义新力场
- Tabulated potential：支持以自定义的势函数描述两原子的键长伸缩、键角弯折、范德华相互作用²⁰¹⁶
- 编辑非键相互作用的缩放因子，从而可通过力场编辑写入 OPLS 力场等²⁰¹⁶
- 支持通过软性约束研究大分子扩散^{5.5}
- 支持并行计算^{5.0}
- 支持多种结构优化方法；具有自动调整所选方法的 Smart 工具
- 支持多种控温函数：Velocity Scale、Nose、Andersen、Berendsen 和 NHL^{6.0}
- 支持多种控压函数，Andersen、Berendsen、Parrinello^{6.0}、Souza-Martins^{7.0}（实现各向异性加压）

- 支持 PPPM^{7.0} 方式处理库伦相互作用
- 支持包含拖尾效应修正的范德华力处理^{7.0}
- 所有力场均可以根据成键情况，自动指派原子的具体参数
- 固定键长的方法，支持更长时间步长的模拟^{8.0}
- 支持直接计算分子的频率^{8.0}

• GULP

GULP 是一款分子力学和分子动力学模拟程序。它可以对具有零维、一维、二维、三维结构的各种材料体系的多种性质进行计算、解释和预测。GULP 具有多种针对性较强的势函数，譬如支持壳层模型的 Bush、Lewis 势以及多种原子嵌入势 (EAM) 和改良嵌入势 (MEAM)，适合于较高精度地研究多种无机材料体系包括金属、合金体系，此外，它还具备 Brenner、 Tersoff 等针对碳材料的势函数，以及可用于研究化学反应的 ReaxFF 力场。不仅如此，GULP 提供了拟合和编辑势函数的工具，可结合量子力学的计算结果或者实验数据，拟合针对性更强的势函数，提高模拟计算精度。对于有机小分子、金属单质、合金、金属氧化物、碳、硅纳米材料、硅铝多孔材料、铀、镆、钷的混合氧化物以及粘土矿物，GULP 均可做较高精度的研究。

GULP 的主要功能：

结构优化

可以优化原子坐标和晶胞参数，支持原子分数坐标和笛卡尔坐标的限定，可加外应力（等静压）

力学性质

弹性常数、体模量、杨氏模量、剪切模量、泊松比

介电、压电性能

压电常数，波恩有效电荷，静态介电常数，光频介电常数张量，介电常数张量随外加电场频率的变化

热力学性质

声子态密度、色散谱^{5.0}（考虑 LO-TO 劈裂），零点振动能、熵、等容热容、亥姆霍兹自由能随温度的变化

光学性质

红外、拉曼光谱、反射率、折射因子、吸收系数、电场梯度张量 (NMR)

动力学计算^a

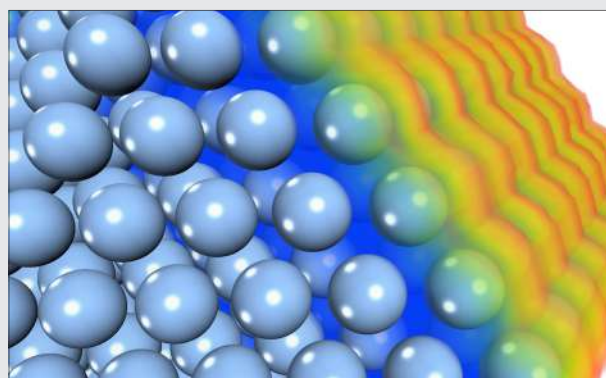
支持 NVE，NVT，NPT 以及 NPH^{6.0} 等系综，以及多种控温控压函数

表面计算

支持表面能、附着能的计算

力场拟合与编辑

选择不同类型的势函数，并拟合参数，组合得到新的力场



GULP 的主要特性：

- 支持外加电场^{5.5}
- 参数依据晶格能、力学性质、介电常数、折射率、压电常数、振动频率、静电势以及晶体结构进行拟合
- 具有多种二体势、三体势、四体势、多体势以及嵌入势函数形式
- 支持 COSMO 溶剂化模型^{5.5}
- 支持通过关键词拓展功能
- 新的积分方法 Stochastic^{6.0}
- 支持反应力场 ReaxFF^{5.5, 6.0} 及适合于研究锂电池的反应力场 ReaxFF Li^{2017 R2}
- 支持二维结构的声子计算
- 支持热导率的计算^{7.0}

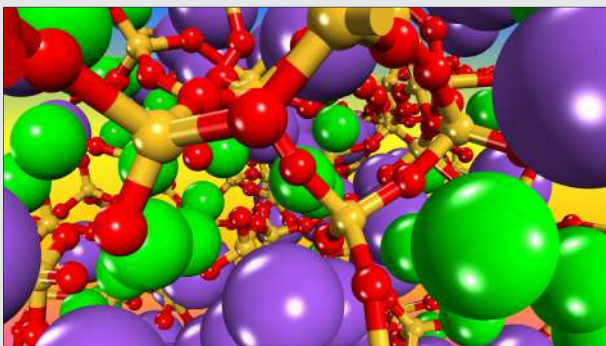
^a 结果分析采用 Forcite Plus 的分析工具，具体内容参考 Forcite Plus 介绍 (09 页)

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

• Amorphous Cell

Amorphous Cell 模块是一个采用蒙特卡洛方法搭建无定形模型的工具。它可用于搭建具有多种组分及不同配比的高分子共混模型、溶液模型、复合材料模型、固液 / 固气界面模型、孔道填充模型、向列型液晶模型等，对塑料、玻璃、食品、化工以及复合材料等领域的模拟工作具有重要的辅助作用。



Amorphous Cell 的主要功能：

模型构建

按照设定的组分、摩尔比构建无定形模型

填充堆积^{5.0}

在已有结构的空隙中按照设定的比例填充指定的分子、原子，并可对空隙进行限定

Amorphous Cell 的主要特性：

- 基于蒙特卡洛方法
- 支持设定体系密度及其变化范围，增加搭建复杂模型的成功率
- 支持任意三维盒子的无定形模型搭建^{5.0}
- 支持扭转角的调整，可以区分主链和支链结构中的扭转角，选择性调整
- 可自动排除原子间距太小或者化学键穿过环状结构等堆积中的不合理因素
- 可同时输出多种可能结构
- 可自动完成输出结果的结构优化
- 支持 Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 等力场，支持自定义力场^{5.0}
- 所有力场均可以根据成键情况，自动指派原子的具体参数
- 支持 Perl 脚本，可以并行计算^{5.0}

• Adsorption Locator

Adsorption Locator 是一款采用蒙特卡罗模拟退火方法搜索吸附质在基底材料上的最低能量吸附构象的程序，它可以给出吸附质的稳定吸附位点、混合吸附质的优先吸附成分、纳米级催化剂的活性位、原子层沉积过程的最稳定位置，帮助研究人员从原子水平上了解吸附过程（结构影响、添加剂作用）。在涂料开发、表面腐蚀研究、催化剂设计以及晶体结晶形貌等领域具有理论指导意义。

Adsorption Locator 的主要功能：

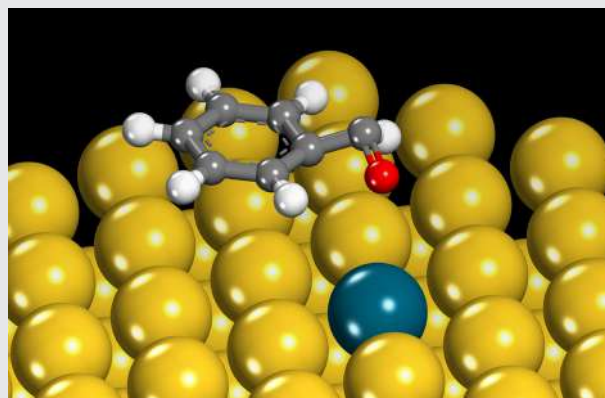
模拟退火方法搜索最低能量吸附构象

主要模拟结果

吸附质在基底上最稳定吸附位置，吸附能和相互作用能

Adsorption Locator 的主要特性：

- 周期性或者非周期性基底材料
- 可指定吸附区域
- 正则系综 (NVT) 模拟
- 支持 Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 等力场，支持自定义力场^{5.0}
- 支持 perl 脚本^{6.0}



• Blends

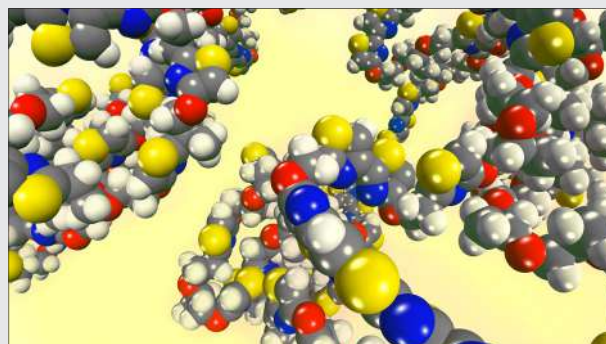
Blends 是一款以力场为基础，采用扩展的 Flory-Huggins 模型估算二元混合物体系相容性的程序，可以有效的缩短工艺探索周期。这些二元混合物包括溶剂 - 溶剂、聚合物 - 溶剂以及聚合物 - 聚合物。这种模拟技术能够直接从二元混合物的化学结构预测出混合物的热力学性质。作为一个快速的筛选工具，Blends 可以在缩减试验次数的同时开发出稳定的产品配方，它在粘结剂、医药品、化妆品、金属特种表面涂层、眼镜和塑胶等材料制备领域具有重要作用。

Blends 的主要功能：

可计算结合能、混合能、配位数、 χ 参数、自由能、二元混合物相图

Blends 的主要特性：

- 支持 Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 或者自定义力场类型^{5.0}
- 可考察 χ 参数随温度的变化
- 基于模拟得到配位数



• Conformers

Conformers 是一款以力场为基础，搜寻分子最低能量构象的程序。它包含多种方法，多种判据以及多种可控条件，能够高效地探索各类分子的构象，包括环状结构的分子。不仅如此，Conformers 还具有一定的分析功能，可以建立分子构象与其能量、偶极矩、回转半径之间的关系。在结晶、催化以及聚合物研究等诸多领域，Conformers 都具有很高的应用价值。

Conformers 的主要功能：

系统扫描

对于一个或者多个指定的扭转角，按照设定的角度间隔、范围进行调整。计算得到的所有构象能量，适用于扭转角数目较少的简单分子

随机取样

在设定的变化范围和取样数目条件下，随机调整扭转角的度数

波尔兹曼跳跃

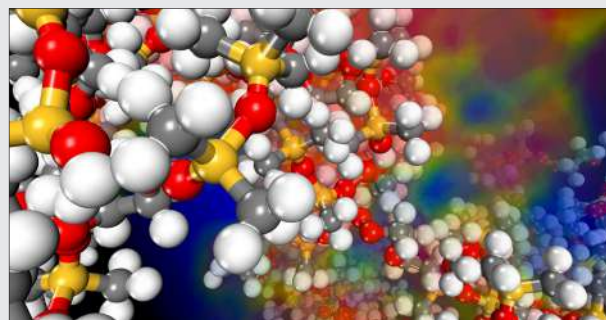
引入了 Metropolis 选择准则的随机取样方法，利用波尔兹曼因子辅助判断扭转角调整的合理性，适用于扭转角数目较多的复杂分子

可分析的性质

能量，几何优化，扭转角度数，偶极矩，回转半径，径向分布函数的差异，原子位置均方根偏差，扭转角的均方根偏差

Conformers 的主要特性：

- 自动寻找结构中的扭转角
- 支持对所得到的构象进行结构优化，并限定相应的扭转角度数
- 支持 Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 或者自定义力场类型^{5.0}
- 可搜索环状分子的构象
- 范德瓦尔斯半径，原子坐标、扭转角的均方根偏差，径向分布函数、原子间距的偏差都可以作为构象合理性的判断依据



Materials Studio™

新一代材料模拟软件

• Sorption

Sorption 是一款基于巨正则蒙特卡洛 (GCMC, Grand Canonical Monte Carlo) 方法预测单一或混合组分在微孔材料和介孔材料中吸附的程序。它所涉及的体系包括分子筛、铝磷酸盐、粘土、纳米管、聚合物膜、硅胶、活性炭和金属-有机骨架材料等。Sorption 可直接给出吸附等温线 (载荷曲线)、亨利常数等性质, 可应用于气体分离、烃类裂解、气体传感器以及离子交换等诸多领域的研究, 大大提高工业用气体、石油石化产品以及特种催化剂的生产效率, 有助于提升商业利润。

Sorption 的主要功能 :

固定压强

模拟在吸附气体 (单一或混合组分) 逸度一定的情况下, 达到平衡时, 气体分子在吸附剂中的吸附情况

固定载荷

模拟在吸附气体分子 (单一或混合组分) 数目一定的情况下, 达到平衡时, 气体分子在吸附剂中的吸附情况

亨利常数

计算亨利常数

吸附等温线

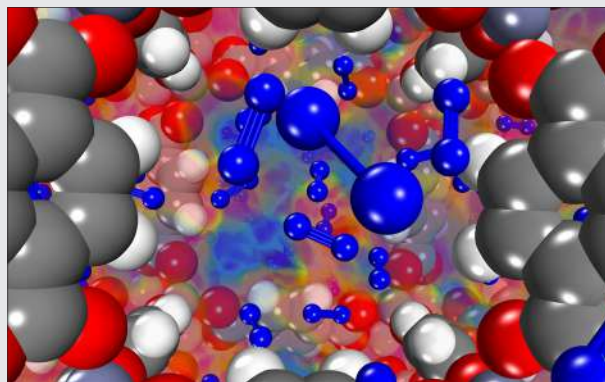
计算设定温度、压强范围的吸附等温线

吸附位

搜寻最稳定的吸附位点

吸附情况的表征

吸附等温线、等压线以及吸附等量线, 吸附能和能量分布曲线, 最低能量吸附位, 图形化显示密度、能量场 (用于观察吸附位置及吸附区域)



Sorption 的主要特性 :

- 支持周期性体系, 孔状或表面结构
- 可研究纯组分或者混合吸附质
- 支持 Metropolis (刚性分子) 和 Configurational bias (柔性分子) 两种 MC 方法
- 可以限定吸附质分子吸附的空间范围, 进一步提高了计算的精度和效率
- 支持 Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 以及自定义力场^{5.0}
- 支持 perl 脚本编程处理^{6.0}

• Synthia

Synthia 是一款以美国陶氏公司 Jozef Bicerano 博士的工作为基础, 使用先进的定量结构 - 性能关系方法 (QSPR, Quantitative Structure Property Relationship) 预测聚合物性质的程序。不同于传统的基团贡献法, Synthia 使用聚合物的拓扑信息, 特别是源于图论的连接指数, 建立原子和化学键与聚合物性质的关联, 因此, 它可以预测由碳、氢、氧、氮、硅、硫、氟、氯和溴组成的所有聚合物的性质, 而不受基团贡献数据库的限制。Synthia 的预测结果在实际工作中得到了广泛的验证。

Synthia 能够预测的性质 :

链的刚度和缠绕

特征比、临界分子量、缠绕长度、缠绕分子量、摩尔刚度函数、位阻参数

电学、光学和磁学性质

抗磁化率、介电常数、摩尔折射率、折射率、体积电阻率

力学性质

脆性断裂应力、体模量、泊松比、剪切模量、剪切屈服应力、杨氏模量

结构特性

连接指数、重复单元长度、重复单元分子量、重复单元的非氢原子、重复单元原子数

热物理性质

玻璃化转变温度时的摩尔热容变化、热膨胀系数、内聚能、等压热容（固相 / 液相）、密度、玻璃化转变温度、摩尔体积、次级弛豫温度、溶解度参数、表面张力、热导率、范德瓦尔斯体积

输运性能

粘流活化能、零切变速率粘度、氧气 / 氮气 / 二氧化碳渗透率

■ 介观模拟方法

“模型粗粒化”是介观模拟方法与其它模拟方法的一个显著区别。所谓的“模型粗粒化”，是指将通常模型中的若干个原子视为一个基本结构单元，等效为一个“珠子”，而这种由珠子构成的结构模型，称为“粗粒化模型”。介观模拟方法即是采用各种势函数描述珠子间的相互作用，以及在这种作用存在条件下，珠子的分布、运动，分析各种分布所形成的拓扑形貌以及与运动相关的结构、动力学性质。

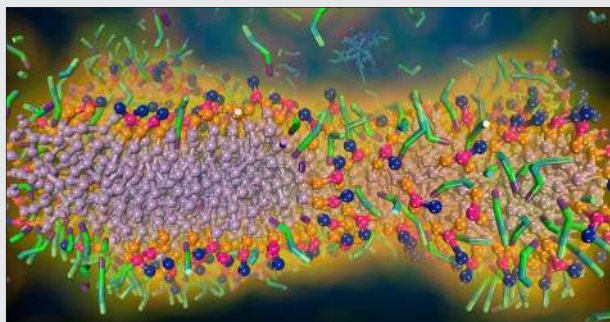
“模型粗粒化”使得介观模拟方法能够用更少的粒子，更简单的势函数形式，描述更大尺度的体系，它可以研究微米尺度模型在微秒范畴内的动力学过程。目前，常见的介观模拟方法包括：基于保守力、耗散力以及随机力描述珠子间相互作用的耗散粒子动力学 (DPD, Dissipative Particle Dynamics)；基于 Martini、Shinoda 力场描述珠子间相互作用的粗粒化分子动力学 (CGMD, Coarse-Grained Molecular Dynamics)；基于朗之万方程 (Langevin equation) 的平均场密度泛函方法 (Mean-Field Density Functional Method)。介观模拟方法所能研究的体系包括：聚合物体系、各种溶液体系、复合材料体系、纳米材料体系。

Materials Studio 中的介观模拟模块：

Mesocite(耗散粒子动力学、粗粒化分子动力学)；

MesoDyn(平均场密度泛函方法)

• Mesocite



Mesocite 是一个包含粗粒化分子动力学以及耗散粒子动力学两种方法，并以软凝聚态材料为主要研究对象的介观模拟工具。依靠介观方法在时间和空间尺度上的优势，Mesocite 可以更加快捷的研究添加剂、溶剂、单体类型、比例对各种均聚、嵌段、枝状聚合物结构、性能的影响；研究大分子的扩散；研究纳米复合材料中纳米管的分散性等。它在复合材料、涂料、化妆品以及药物的控释领域具有重要应用。

Mesocite 的主要功能：

结构优化

优化珠子坐标和盒子尺度，支持珠子的分数坐标或笛卡尔坐标、盒子尺度的限定，可以添加外应力（等静压）

动力学计算

基于牛顿运动方程，研究珠子在特定系综（NVE、NVT、NPT、NPH）下的运动，可分析得到的性质请参考 Forcite Plus 动力学计算部分

剪切模拟^{6.0}

基于非平衡动力学，做剪切模拟，控制剪切方向和速度，得到剪切粘度、应力张量

DPD

运用耗散粒子动力学方法模拟

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

Mesocite 的主要特性：

- 不同珠子的质量和体积保持一致，可指定珠子电荷
- 支持调用和编辑 Martini 以及 Shinoda2007 力场
- Tabulated potential：支持以自定义的势函数描述两珠子的键长伸缩、键角弯折、范德华相互作用²⁰¹⁶
- 密度场可视化分析^{5.5}
- 支持 Perl 脚本扩展模拟和分析功能，譬如控制轨迹文件的输出^{6.0}
- 支持包含拖尾效应修正的范德华力处理^{7.0}
- DPD 模拟支持物理单位

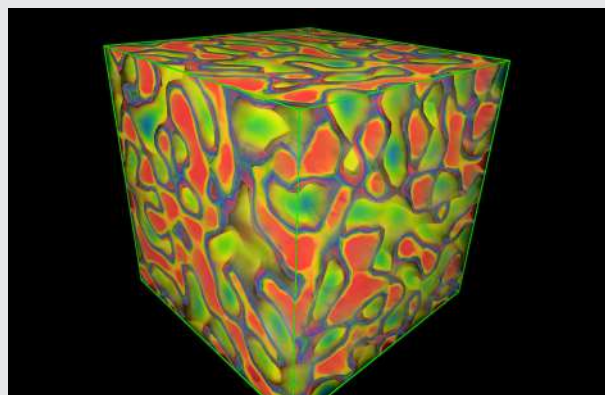
• MesoDyn

MesoDyn 是一款基于动态平均场密度泛函方法的介观模拟程序，主要用于复杂流体，包括聚合物熔体和混合体系在介观尺度的动力学研究。它将真实的聚合物转化为高斯链 (Gaussian Chain) 模型，将真实体系的动力学过程转变为不存在相互作用的高斯链在一个平均场作用下的运动，此时的运动利用朗之万泛函方程描述，此时的平均场则与表征聚合物相互作用的 Flory-Huggins 参数密切相关。MesoDyn 可以模拟 100-1000nm 的体系，可以非常方便的研究复杂流体、聚合物共混的动力学过程和稳定拓扑形貌，在涂料、化妆品、混合材料、表面溶剂、复杂药物传输以及相关领域具有广泛应用。

MesoDyn 的主要功能和特性：

- 模拟混合相形貌可考虑一定的限制条件，譬如聚合物在夹板间的分布
- 模拟聚集和凝固过程
- 模拟剪切对形貌影响
- 分析浓度分布剖面图
- 分析密度场
- 分析体系自由能、熵变
- 分析势能分布
- 分析序参数

- 支持并行计算^{5.0}
- 支持多种结构优化方法；具有自动调整所选方法的 Smart 工具
- 支持多种控温函数：Velocity Scale、Nose、Andersen、Berendsen 和 NHL^{6.0}
- 支持多种控压函数：Andersen、Berendsen 和 Parrinello^{6.0}、Souza-Martins^{7.0}(实现各向异性加压)
- 支持 PPM 方式处理库伦相互作用^{7.0}



- 平均场密度泛函方法
- 支持 Donnan 以及 Debye-Huckel 两种给珠子附加电荷的方法
- 根据 Flory-Huggins 参数定义珠子之间相互作用
- 可在前次基础上，改变作用参数，继续模拟计算
- 支持并行计算

■ 晶体、结晶与仪器分析方法

晶体结构解析与晶粒形貌预测在晶态材料性质研究、药物晶体筛选等方面有着广泛的应用。

Materials Studio 提供了两种不同的方法辅助晶体结构的解析：其一，基于经典模拟方法中的各种力场，结合对称性，从能量的角度找到分子的各种稳定排列和堆积，辅助分子晶体结构的解析；其二，对粉晶 X 射线衍射图谱、中子衍射图谱以及电子衍射图谱进行指标化，然后利用蒙特卡洛模拟退火法或者回火法，在指标化数据的基础上构建材料的粗略结构，最后利用传统的 Rietveld 方法精确确认结构中各原子的坐标及相关的参数。对于实验数据不易确认的轻元素位置，可以结合势函数，从能量的角度辅助确认。

Materials Studio 提供了面间距、表面附着能以及表面自由能三种不同的判据辅助判断特定晶体结构材料可能的晶粒形貌，可以结合经典模拟方法引入对环境因素（溶剂、温度等）的考量。

Materials Studio 中的晶体结构解析模块：

Polymorph Predictor(基于力场找到分子的稳定堆积)；
X 射线、中子、电子衍射图谱解析工具包

Materials Studio 中的晶粒形貌预测模块：

Morphology(包含多种通用力场，预测晶粒形貌)

• Polymorph Predictor

Polymorph Predictor 是一个以力场为基础，采用蒙特卡洛模拟退火法，由给定化合物的分子结构预测其多晶型的工具。晶体材料在制药、农药、染料、炸药以及专用化学品工业中有着非常普遍的应用，然而，由于晶体结构的多样性，即使具有相同的分子结构，这些晶体材料在贮存期、生物药效、溶解性、形貌、蒸汽压、密度、颜色和冲击感度等方面往往具有明显差异，因此，对材料各种可能晶型的预测和性质研究显得非常重要。

Polymorph Predictor 的主要特性：

- 可在 230 个空间群中进行搜索
- 堆积过程支持分子扭转角调整
- 支持 Perl 脚本
- 可对预测结构做更精确的 Rietveld 精修^a
- 支持 Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 或者自定义力场类型
- 支持并行计算^{5.5}
- 多种可控参数，保证预测的高效和准确

^a需要调用 Reflex 模块

Polymorph Predictor 的主要功能：

堆积

基于蒙特卡洛模拟退火方法，在指定空间群中搜索给定分子的各种可能堆积、排列形式（晶体结构）

聚类

基于各类原子的径向分布函数分析，得到各种堆积、排列形式的相似度，据此对其进行分类，并给出各类堆积中，能量最低的一种晶体结构

结构优化

优化分子排列，包括晶胞参数

多晶型预测

按照堆积、分类、结构优化、分类的顺序，自动完成多晶型预测工作

结果分析

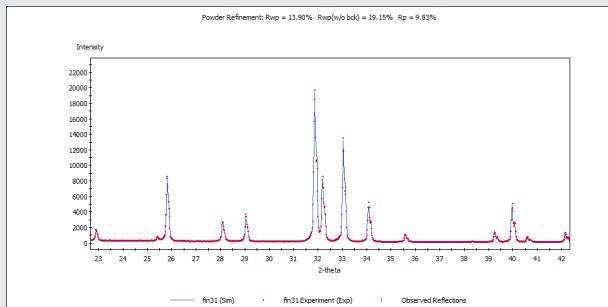
给出能量最低的若干种晶体结构，以及对应的空间群、晶胞参数、密度、能量；给出它们的 XRD 图谱与实验 XRD 图谱的差异^a；给出它们与参考结构间的相似度^b；并可根据相似度，对这些晶体结构作进一步分类^c

^a 利用 Powder Comparison 函数；^b 利用 Crystal Similarity 函数；^c 利用 Polymorph Clustering 函数

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

• X 射线、中子、电子衍射图谱解析工具包



• Reflex

一个由材料粉晶 X 射线、同步辐射 X 射线、中子或者电子衍射图谱获取其晶体结构、结晶度的工具包。

Reflex 的主要功能：

衍射模拟

基于晶体结构模拟对应的粉晶衍射图谱

指标化

基于 X-Cell、DICVOL91、TREOR90 以及 ITO15 方法对衍射图谱进行指标化，得到可能的晶胞参数、空间群

结构精修

- Pawley 修正
确认晶胞参数，修正峰形和背底参数、样品宽化参数、各个峰的衍射强度
- Rietveld 修正
进一步确认晶胞参数，原子的精确位置，修正峰形和背底参数、样品、仪器宽化参数、择优取向参数、温度因子以及原子占位率
- 考虑能量影响的 Rietveld 修正
在 Rietveld 修正基础上引入能量比重因子，修正剩余方差因子 Rwp
- Pareto 优化
得到能量比重因子与 Rwp 之间的关系曲线，辅助判断能量因子取值大小

结晶度计算

- 背底扣除法
一种简单、近似的方法，不需要单相衍射图谱作为参考，适于较为粗略地估计结晶度
- 相分析方法
基于定量物相分析的方法，需要参考晶相和非晶相的衍射图谱。为了提高结晶度计算的精度，所使用衍射图谱均需基于相同的测试条件

• X-Cell

一种建立在传统二分法基础上高效、易用的新指标化方法。

X-Cell 的主要特性：

- 将系统消光规律引入指标化过程
- 能够给出细长或扁平晶胞的高质量指标化结果
- 成功率达到 92%，远高于传统的 DICVOL(46%)、TREOR(46%)、ITO(33%) 方法^a
- 允许用于指标化的衍射峰中出现杂质相衍射峰
- 指标化结果已然考虑仪器零点漂移

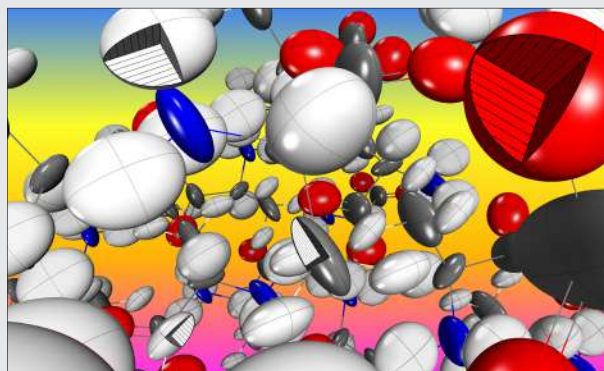
^a 基于 24 种代表性体系的测试

衍射图谱处理

支持对衍射图谱进行去背底、去 $K\alpha_2$ 峰、平滑、插值等处理

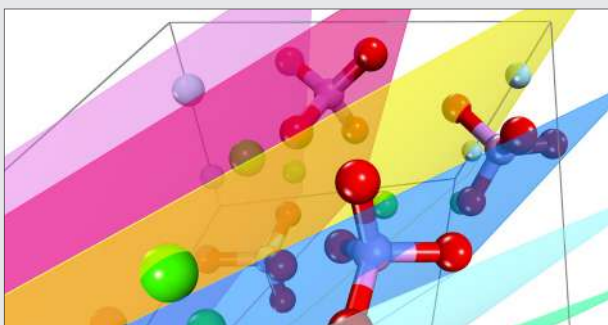
Reflex 的主要特性：

- 与经典分子模拟技术结合，以结构稳定性辅助结构解析，特别是轻原子坐标的确认
- 支持多种实验数据格式：Bruker、Stoe、Scintag、Rigaku(Jade)、Philips、JCAMP、Galactic SPC、GSAS raw、ILL、PAnalytical XRDML
- Pawley 修正方便获得各种峰形函数的初始值
- 支持多种靶材的快速设定，支持入射波波长、偏振的设定，支持单色器设定
- 可直接把数据导出为 CIF 文件
- 支持 Perl 脚本^{6.0}



• Reflex Plus = Reflex + Powder Solve

Powder Solve 是一个基于蒙特卡洛模拟退火法或者平行回火法,堆积得到材料晶体结构的工具。它可以在材料密度、化学式、晶胞参数、空间群确认的基础上,得到原子各种可能的堆积排列方式,并依据其衍射图谱与实测衍射图谱的差异(剩余方差因子),对各种堆积方式作出取舍。Powder Solve 为进一步的 Rietveld 修正提供初始结构,适于全新晶体结构的研究。



Powder Solve 的主要特性 :

- 自动继承 Pawley 修正得到的各种参数
- 支持对结构中角度和距离的限定,减少结构自由度,提高原子堆积效率^{6.0}
- 可避免出现存在原子近距离接触的不合理堆积

• Reflex QPA

Reflex QPA(Quantitative Phase Analysis) 是一个基于材料粉晶 X 射线、中子或者电子衍射图谱进行物相分析的工具。各个单相的衍射图谱、晶体结构,都可用于混合相衍射图谱的分析,给出各个单相的百分比含量。

Reflex QPA 的主要功能 :

完整修正

计算各个单相在混合物相中的相对含量,并对各个单相的参数进行 Rietveld 修正

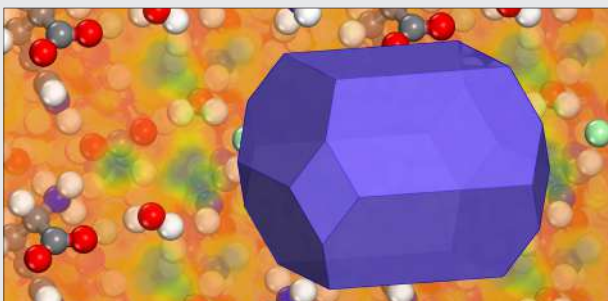
修正相对含量

仅计算各个单相的相对含量,不对各个单相的参数进行 Rietveld 修正

Reflex QPA 的主要特性 :

- 可基于混合相衍射图谱和单相晶体结构计算各相的相对含量
- 可基于混合相衍射图谱、单相晶体结构以及衍射图谱共同计算各相的相对含量
- 可基于混合相衍射图谱和单相衍射图谱计算各相的相对含量
- 支持内标法确认各单相相对含量

• Morphology



Morphology 是一个通过材料晶体结构预测其晶粒形貌的工具。它可对特定添加剂、溶剂以及杂质存在下的晶体形貌研究提供帮助。其主要应用领域包括医药品、农用化学品、食品科学、石油化工、水泥、日用品以及特殊化学品等。

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

Morphology 的主要功能：

晶体图像

基于力场，筛选和计算晶体中存在的各种相互作用，可为晶面附着能和自由能的计算提供参考和依据，是 Morphology 自带的一个能量计算引擎

晶面 Miller 指数列表

基于 Donnay-Harker 规则，输出可能的晶体生长面列表和对应的面间距

BFDH 方法

基于 Donnay-Harker 规则，判断可能的晶体生长面；基于 Bravais-Friedel 规则，预测晶面相对生长速率

生长形貌方法

基于计算得到的晶面附着能，预测晶粒形貌

平衡形貌方法

基于计算得到的晶面自由能，预测晶粒形貌

■ 定量构效关系

QSAR(Quantitative Structure Activity Relationship, 定量构效关系)，是化学、化工以及材料领域中的一种重要研究手段。它通过构建材料的实验信息(“性质”)和分子水平特征(“描述符”)之间的统计回归模型，进而预测未知材料的性质。所涉及的体系包括分子晶体、无机晶体、分子筛、高聚物、表面活性剂等。QSAR 的应用可以极大的提升高性能材料的研发速率。

QSAR 的主要功能：

初始分析

包括单变量分析、数据标准化、数据转化、数据相关性分析等功能

数据简化

基于主成分分析完成数据简化

聚类分析

包括相似度、层序聚类和非层序聚类分析

聚类评价

包括判别分析和聚类重要性分析

生成晶体惯态(晶体习性)

给出指定晶面所围成的晶粒形貌

列出晶体惯态性质

输出所得晶粒形貌的相关参数，包括围成晶粒的各个晶面的面积和相对比值

Morphology 的主要特性：

- 可以调用 Forcite 作为能量计算引擎，使用 Ewald 等更加精确的非键相互作用处理方式
- 支持 Perl 脚本
- 可以改变某些晶面的表面能、附着能，来考虑特定添加剂、溶剂对晶体形貌的影响
- 支持 Universal、COMPASS II、Dreiding、PCFF、CVFF 或者自定义力场类型
- 可计算表面电荷以及表面极化能，修正极性表面自由能

模型构建

基于多种方法建立数学模型，具体方法参见 QSAR 中的建模方法

孤立点分析

基于响应数据的残值，分析不满足预测模型的数据对象，即孤立点

QSAR 中的建模方法：

- 多元线性回归方法
- 遗传算法
- 偏最小二乘方法
- 神经网络算法^a

^a 此建模方法仅包含在 QSAR Plus

QSAR 中的描述符：

原子体积、表面参数

输出分子的 Connolly、vdW、Solvent-Accessible 表面面积、包围的体积以及自由体积 (三维晶体结构)

原子描述符

输出总电荷、总的形式电荷、总的分子质量、总的原子数, 指定元素的原子数

快速描述符

- 拓扑描述符 (输出 Wiener 指标、Zagreb 指标、Kier and Hall 分子连接性指数)
- 结构描述符 (输出手性中心、可扭转化学键、氢键受体以及氢键给体数目)
- 热力学描述符 (输出 AlogP、AlogP98、摩尔折射率)
- 电性拓扑态描述符 (输出 E-state keys, 既表征原子在分子中的拓扑信息, 也描述分子中所有原子间的电性关系)
- Information-content 描述符

分子片段计数

输出分子中, 各种碳氢基团、官能团以及环状结构基团的数目

几何参数

输出分子中标定的距离、角度、二面角数值以及标定的个数

Jurs 描述符

在原子电荷 (QEq、Gasteiger 或者人为指定) 和溶剂可及的表面面积间建立映射, 输出分子的溶剂可及面积、正 / 负电荷原子的溶剂可及面积及其各种权重值、极性 / 非极性原子的溶剂可及面积等

结构标注

根据定义的模板, 标注结构中的感兴趣的原子、几何参数, 并统计模板结构在目标结构中的数目

周期性描述符

输出三维周期型结构的晶胞参数、晶胞体积、密度、空间群, 二维表面结构的结构参数和面群

空间描述符

输出分子 vdW 表面积、体积、分子密度、分子转动惯量、回转半径、惯量椭球体积、分子投影指数、偶极矩

吸附参数

输出吸附能、吸附形态以及吸附能的分布 (基于 Adsorption Locator 引擎)

DMol³ 描述符^a

输出结构 (分子、晶体)、能量 (总能、带隙、束缚能、HOMO、LUMO、零点振动能)、偶极矩、原子电荷、Fukui 指数、态密度 (Fermi 能级处的值)、溶剂化模型相关能量和参数 (所有计算基于 DMol³ 引擎)

Forcite 描述符

输出原子电荷、能量 (总能量, 以及将能量分解为各个部分的贡献, 包括氢键的贡献)、结构 (所有计算基于 Forcite 引擎)

晶体相似性

给出晶体结构与参考结构的相似度

多晶型聚类分析

输出聚类分析得到的类的数目, 以及每个结构与所在类中的能量最低结构的相似度值和相应的排序 (所有计算基于 Polymorph Predictor 引擎)

粉晶比较描述符

输出各个晶体结构的模拟 X 射线衍射谱与参考 (实验) X 射线衍射谱的比较结果, 包括 Rwp、Rp 以及 CMACS 值 (模拟 X 射线衍射谱计算基于 Reflex 引擎)

VAMP 描述符

输出总能、电子能量、形成热、轨道能量 (HOMO/LUMO)、偶极矩、四极矩、十极矩、平均极化率、分子表面积、分子点群、分子结构、原子电荷

^a 此描述符仅包含在 QSAR Plus 中

Materials Studio™

新一代材料模拟软件

Materials Studio 中的 Perl 脚本

随着分子模拟技术的发展，为了更好、更灵活地使用各个模块的功能、处理得到的数据，Materials Studio 逐步开放了基于 Perl 语言的脚本编写。

它能够实现多种计算过程的自动化处理：

- 重复性计算任务的自动化处理
- 涉及多个模块、多种任务的流程化计算过程的自动化处理

能够拓展 Materials Studio 的应用：

- 实现 Materials Studio 中的模块所不具备的模拟功能
- 在 Materials Studio 中整合其它程序

Materials Studio 提供了丰富的应用程序接口，涉及到文件处理、模型搭建以及囊括量化方法、经典模拟方法、介观模拟方法、结构解析方法在内的 13 个功能模块。

Materials Studio 在硬盘上建立了独立的文件夹保存脚本文件，并在 Visualizer 中增加了 User 菜单选项，通过这个选项可以打开 Script Library 窗口，实现脚本管理和调用的界面操作^{6.0}。

Materials Studio 在各个建模、计算以及分析窗口中，都添加了脚本生成按钮，方便把相应的操作转换为脚本^{7.0}，为脚本的使用提供了极大的便利。

Perl 脚本的应用程序接口：

文件相关

.xsd、.xcd、*.xtd 文件，力场文件、Study table 文件、文本文件

模拟模块

AdsorptionLocator、AmorphousCell、CASTEP、CCDC、DFTB+、DMol³、ForcitePlus、Mesocite、Morphology、PolymorphPredictor、Reflex、Sorption、VAMP

Materials Studio 与 Pipeline Pilot 的结合

什么是 Pipeline Pilot ？

Pipeline Pilot(PP) 的是 Accelrys 公司旗下的一款图形化工作流软件，具备功能强大的信息整合和流程定制能力，其在优化研究创新周期、提高工作效率与减少研究和 IT 经费方面能发挥巨大作用。用户不仅能够通过 Pipeline Pilot 整合和挖掘海量的研究数据、自动化数据的分析流程，而且还可以实现企业级的研究成果快速分析、可视化与共享，提升大范围的协作能力。

Pipeline Pilot 与 Materials Studio 的整合

Materials Studio 在菜单中具有 pipeline pilot protocols 选项，可以直接调用 Pipeline Pilot 的相关计算功能^{6.0}；Pipeline Pilot 中的 Materials studio component collection(MSC) 模块集成了 MS 中主要的建模和模拟工具，可以为材料研究的预测分析和自动化工作流程提供完整的软件解决方案。

Materials Studio 运行的软硬件环境^a

服务器端操作系统

Windows	x86-64 Linux(Including Cluster)
<p>只支持 64 位服务器操作系统 .</p> <ul style="list-style-type: none"> • Windows 7 (Professional & Enterprise) - SP1 • Windows 8.1 (Professional & Enterprise) • Windows 10 (Professional & Enterprise) • Windows Server 2012, all editions – R2 • Windows Server 2016 <p>Materials Studio 不支持在 Windows Cluster 上的安装</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Red Hat Enterprise Linux Server 6-64bit • Red Hat Enterprise Linux Server 7-64bit • SuSE Linux Enterprise Server 11-64bit

服务器硬件环境^b

Intel® Core™ i7 或兼容的 CPU
 8 GB 以上内存，内存越大，处理体系越大
 安装需要 4GB 硬盘空间

客户端操作系统

- Windows 7 (Professional & Enterprise) - SP1
- Windows 8.1 (Professional & Enterprise) - (64-bit only)
- Windows 10 (Professional & Enterprise) - (64-bit only)

客户端硬件环境^b

Intel® Core™ i5 或兼容的 CPU
 3-Button 鼠标
 显示器分辨率在 1024 × 768 以上
 4 GB 以上内存
 安装需要 4GB 硬盘空间
 16-bit / 65536 colors 显卡 (最低要求)。高性能的显卡，将极大提高模型，色阶图的显示质量，对于大体系的动态演示至关重要

^a 上述软硬件环境适用于 Materials Studio 2018 版本

^b 具体配置请与硬件工程师联系



创腾科技有限公司成立于2000年初，是业界领先的面向生命科学和材料科学领域提供综合研发、过程、检测、生产信息化平台及咨询服务的高新技术企业。创腾科技的业务总部设在北京，在上海设有研发中心。

作为一家业界领先的信息技术公司，创腾科技可以为生命科学和材料科学的用户，提供包括计算模拟与数据建模、科技创新信息化两大平台的综合解决方案和服务，提升这些用户在研发、过程、检测、生产等领域的管理、决策和创新能力。创腾科技与国际上在业界领先的著名信息技术公司拥有长期而紧密的合作关系，并拥有业界最先进的开发平台和较强的研发能力，能够为中国的企业和科研机构提供当前世界上最先进的信息技术解决方案和服务。

作为一家高科技企业，创腾科技拥有一支具有专业背景和IT背景的高素质复合型人才队伍，以及经验丰富的管理团队，能够保证向用户提供一流的技术支持和服务。现在，在中国已有超过500家的单位得到了创腾科技所提供的产品和服务，其中包括国内最大的制药企业，最大的新药研发外包企业、最大的石化企业以及主要的高校和科研单位等。

为客户提供持续一流的产品和服务，不断为客户创造价值，是创腾科技努力的目标。创腾科技愿意为提高中国科研机构和企业的创新能力与核心竞争能力，做出自己的贡献。

创腾科技有限公司

NeoTrident Technology LTD.

北京办公室

北京市中关村科学院南路2号
融科资讯中心C座南楼1512室
邮政编码：100190
电话：+86 10 82676188
传真：+86 10 82677178

上海办公室

上海市浦东新区张江达尔文路88号
半岛科技园11栋4楼
邮政编码：201203
电话：+86 21 51821768
传真：+86 21 51821758

苏州办公室

江苏省苏州市工业园区东长路88号
2.5产业园A2栋301室
邮政编码：215028
电话：+86 512 67509707
传真：+86 512 67509705

广州办公室

广州市天河区黄埔大道西33号
三新大厦16-E房
邮政编码：510620
电话：+86 020-88527961

创腾官网：www.neotrident.com

创腾学院：training.neotrident.com



官方微信