



培训内容

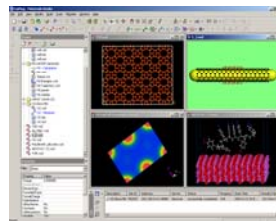
- **Materials Studio**
- 分子力学原理简介及MS Forcite Plus概述
- MS Forcite Plus参数设置技巧
- MS Forcite Plus应用实例
- MS Forcite Plus hands-on练习
- **Q&A**

培训内容

- **MaterialsStudio**
- 分子力学原理简介及MS Forcite Plus概述
- MS Forcite Plus参数设置技巧
- MS Forcite Plus应用实例
- MS Forcite Plus hands-on练习
- **Q&A**

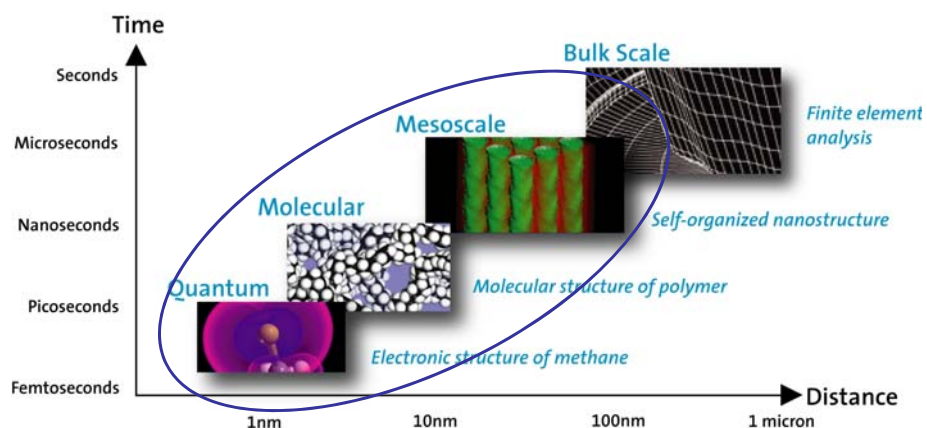
Materials Studio是整合的计算模拟平台

- 可兼顾科研和教学需求
- 可在大规模机群上进行并行计算
- 客户端-服务器 计算方式
 - Windows, Linux
 - 最大限度的使用已有IT资源
- 包含多种计算方法
 - DFT及半经验量子力学
 - 线形标度量子力学
 - 分子力学
 - QM/MM方法
 - 介观模拟
 - 统计方法
 - 分析仪器模拟
 -



- 全面的应用领域
 - 固体物理与表面化学
 - 催化、分离与化学反应
 - 半导体功能材料
 - 金属与合金材料
 - 特种陶瓷材料
 - 高分子与软材料
 - 纳米材料
 - 材料表征与仪器分析
 - 晶体与结晶
 - 构效关系研究与配方设计
 -

Materials Studio可对不同时间和空间尺度的体系进行研究



培训内容

- **MaterialsStudio**
- 分子力学原理简介及**MS Forcite Plus**概述
- **MS Forcite Plus**参数设置技巧
- **MS Forcite Plus**应用实例
- **MS Forcite Plus hands-on**练习
- **Q&A**

分子力学方法

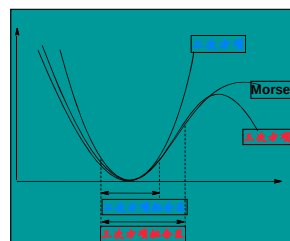
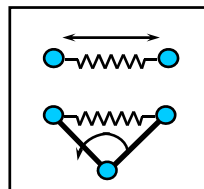
- 使用球和弹簧来描述原子之间所成的共价键
- 包括非键Van der Waals作用和静电相互作用
- 通过实验手段和/或QM计算来获取相关参数
- 通常与动力学、结构优化或者蒙特卡罗方法联用
- 非常适合于模拟分子与晶体间的相互作用

吸附能
 吸附等温线
 扩散速率
 分离
 沸石体系
 IR 光谱
 高分子性质
 粘性
 玻璃态结构

模块的概念 —— 分子力学

Solutions for discovery

$$\begin{aligned}
 V(r_1, r_2, \dots, r_N) &= V_r + V_a + V_\theta + V_{nb} + V_q \\
 &= \sum_{\text{bonds}} \frac{1}{2} K_r [r - r_{eq}]^2 + \sum_{\text{angle}} \frac{1}{2} K_a [\alpha - \alpha_{eq}]^2 \\
 &\quad + \sum_{\text{dihedrals}} K_\theta [1 + \cos(n\theta - \delta)] \\
 &\quad + \sum_{\substack{\text{pairs}(i,j) \\ i < j}} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right] \\
 &\quad + \sum_{\substack{\text{pairs}(i,j) \\ i < j}} \frac{q_i q_j}{\epsilon_{ij}}
 \end{aligned}$$

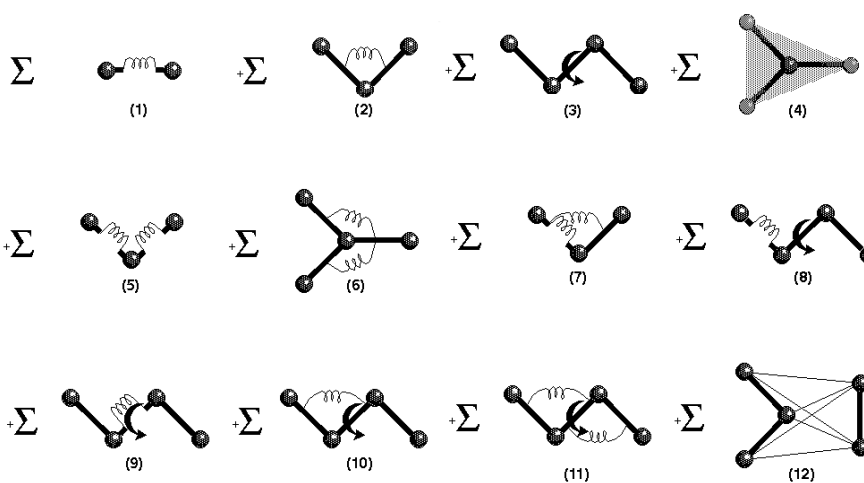


创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

创腾科技有限公司

力场表达式 – Part 2

Solutions for discovery



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

创腾科技有限公司

CVFF 力场函数形式

$$\begin{aligned}
E_{\text{pot}} = & \sum_b D_b [1 - e^{-\alpha(b-b_0)}] + \sum_{\theta} H_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{\phi} H_{\phi} [1 + s \cos(n\phi)] \\
& + \sum_{\chi} H_{\chi} \chi^2 + \sum_b \sum_{b'} F_{bb'} (b - b_0) (b' - b'_0) + \sum_{\theta} \sum_{\theta'} F_{\theta\theta'} (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0) \\
& + \sum_b \sum_{\theta} F_{b\theta} (b - b_0) (\theta - \theta_0) + \sum_{\phi} F_{\phi\theta\theta'} \cos\phi (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0) + \sum_{\chi} \sum_{\chi'} F_{\chi\chi'} \chi \chi' \\
& + \sum \varepsilon [(r^*/r)^{12} - 2(r^*/r)^6] + \sum q_i q_j / \varepsilon r_{ij}
\end{aligned}
\tag{1} \tag{2} \tag{3} \tag{4} \tag{5} \tag{6} \tag{7} \tag{8} \tag{9} \tag{10} \tag{11}$$

PCFF & COMPASS
函数形式

$$\begin{aligned}
E_{\text{pot}} = & \sum_b [K_2 (b - b_0)^2 + K_3 (b - b_0)^3 + K_4 (b - b_0)^4] \\
& + \sum_{\theta} H_2 (\theta - \theta_0)^2 + H_3 (\theta - \theta_0)^3 + H_4 (\theta - \theta_0)^4 \\
& + \sum_{\phi} [V_1 [1 - \cos(\phi - \phi_0^0)] + V_2 [1 - \cos(2\phi - \phi_2^0)] + V_3 [1 - \cos(3\phi - \phi_3^0)]] \\
& + \sum_{\chi} K_{\chi} \chi^2 + \sum_b \sum_{b'} F_{bb'} (b - b_0) (b' - b'_0) + \sum_{\theta} \sum_{\theta'} F_{\theta\theta'} (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0) \\
& + \sum_b \sum_{\theta} F_{b\theta} (b - b_0) (\theta - \theta_0) + \sum_b \sum_{\phi} (b - b_0) [V_1 \cos\phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi] \\
& + \sum_{b'} \sum_{\phi} (b' - b'_0) [V_1 \cos\phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi] \\
& + \sum_{\theta} \sum_{\phi} (\theta - \theta_0) [V_1 \cos\phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi] \\
& + \sum_{\phi} \sum_{\theta} \sum_{\theta'} K_{\phi\theta\theta'} \cos\phi (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0) + \sum_{i>j} \frac{q_i q_j}{\varepsilon r_{ij}} + \sum_{i>j} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right]
\end{aligned}
\tag{1} \tag{2} \tag{3} \tag{4} \tag{5} \tag{6} \tag{7} \tag{8} \tag{9} \tag{10} \tag{11} \tag{12} \tag{13}$$

力场 (Force Field)

$$E_{\text{total}} = E_{\text{valence}} + E_{\text{crossterm}} + E_{\text{non-bond}}$$

$$E_{\text{valence}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{torsion}} + E_{\text{oop}} + E_{\text{UB}}$$

 E_{bond} 键伸缩能

 E_{angle} 键角弯曲能

 E_{torsion} 二面角扭转能

 E_{oop} 离平面相互作用项

 E_{UB} Urey-Bradley 项


力场 (Force Field)

$$E_{\text{total}} = E_{\text{valence}} + E_{\text{crossterm}} + E_{\text{non-bond}}$$

 $E_{\text{crossterm}}$ 共价交叉项

缘于两个或多个“弹簧”之间的耦合，是对独立“弹簧”模型的校正

二代力场中引入共价交叉项，实现更高的精度。



一般包括：stretch-stretch、stretch-bend-stretch、bend-bend、

torsion-stretch、torsion-bend-bend、bend-torsion-bend、

stretch-torsion-stretch

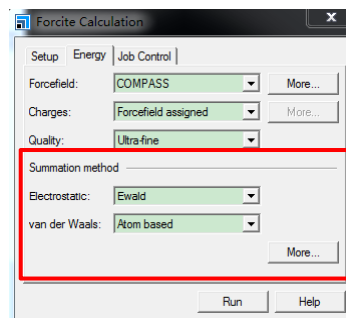


力场 (Force Field)

$$E_{\text{total}} = E_{\text{valence}} + E_{\text{crossterm}} + E_{\text{non-bond}}$$

$$E_{\text{non-bond}} = E_{\text{vdW}} + E_{\text{Coulomb}} + E_{\text{hbond}}$$

- E_{vdW} van der Waals 能
- E_{Coulomb} 静电 (库仑) 相互作用能
- E_{hbond} 氢键作用能



分子力学的本质

分子力学本质上是能量最小化方法。

分子力学从几个主要的典型结构参数和作用力出发来讨论描述结构，即用势能函数来表示当键长、键角、二面角等结构参数以及非键作用等偏离“理想”值时分子能量的变化。采用优化的方法，寻找分子能量处于极小值状态时分子的构型。

MS中的力场 (Forcite Plus)

Consistent Forcefields (一致性力场)

所有的一致性力场均含有相同的函数形式，

差别在于参数化的适用范围略有不同，即：

参数值上有微小差别。

- COMPASS

- pcff

$$\begin{aligned}
 E_{\text{pot}} = & \sum_i [K_i(b - b_0)^2 + K_i(b - b_0)^3 + K_i(b - b_0)^4] \\
 & + \sum_{\theta} [H_1(\theta - \theta_0)^2 + H_2(\theta - \theta_0)^3 + H_3(\theta - \theta_0)^4] \\
 & + \sum_{\phi} [V_1[1 - \cos(\phi)] + V_2[1 - \cos(2\phi)] + V_3[1 - \cos(3\phi)]] + \sum_{\tau} K_{\tau}\tau^2 \\
 & + \sum_{\theta'} \sum_{\phi'} F_{\theta\theta'}(b - b_0)(\theta' - \theta_0') + \sum_{\theta'} \sum_{\phi'} F_{\theta\phi'}(\theta - \theta_0)(\theta' - \theta_0') \\
 & + \sum_{\theta} \sum_{\phi} F_{\theta\phi}(b - b_0)(\theta - \theta_0) + \sum_{\theta} \sum_{\phi} (b - b_0)(V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi) \\
 & + \sum_{\theta'} \sum_{\phi'} (b' - b_0')(V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi) \\
 & + \sum_{\theta} \sum_{\phi} (\theta - \theta_0)(V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi) \\
 & + \sum_{\theta} \sum_{\phi} \sum_{\tau} K_{\theta\phi\tau} \cos \phi (\theta - \theta_0)(\theta' - \theta_0') + \sum_{\theta} \sum_{\phi} \sum_{\tau} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}} + \sum_{\tau} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^2} \right] \right] \\
 & + \sum_{\tau} \left[D_0 \left[\exp \left(- \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right) \right] - 2 \exp \left(- \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right) \right] f_0 - (1 - f_0) \frac{C_0}{r_{ij}^6}
 \end{aligned}$$

MS中的力场 (Forcite Plus)

COMPASS

Condensed-phase Optimized Molecular Potentials for Atomistic Simulation Studies

*ab initio*力场，大多数参数来自于*ab initio* 计算。

COMPASS力场适合于共价分子体系，包括大多数常见有机物、无机物和聚合物、金属、金属氧化物和金属卤化物。

- Group A 共价模型，有机物、聚合物和气体分子
- Group B 离子模型，金属、金属氧化物、金属卤化物、沸石（0 K）

COMPASS26 增加二苯醚、苯腈、叠氮化物、醇类新参数，改进甲烷的参数

COMPASS27 加入二硫键基团的参数

COMPASS 加入硫酸根、磷酸根基团的参数

MS中的力场 (Forcite Plus)

pcff polymer consistent forcefield

基于CFF91力场发展而来，适用于**聚合物及有机物**。

Pcff力场可用于聚碳酸酯类、多糖类等聚合物、无机和有机材料，包括约20种金属（Li, K, Cr, Mo, W, Fe, Na, Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, Au, Al, Sn, Pb）、糖类、脂类和核酸，以及惰性气体（He, Ne, Kr, Xe）。

pcff力场会有所更新，最新的版本始终命名为**pcff**。于此同时，较早的一个版本也会保留下来，用于验证和已有工作的继续，例如**pcff30**。

MS中的力场 (Forcite Plus)

cvff consistent-valence forcefield

一致性价力场，最初以生化分子为主，后经不断强化，适用于**各种多肽、蛋白质与大量的有机分子体系**。

cvff

cvff_nocross_nomorse 当体系能量较高时，Morse函数会允许成键原子分离至不合理的距离。

当体系结构远离平衡时，交叉项可能是不稳定的。

MS中的力场 (Forcite Plus)

普适力场 适度的准确预测

Universal 元素周期表的完整覆盖。适用于计算有机、主族无机分子和金属络合物的几何结构、构象能量差异。对于有机金属体系或其他力场不包含相关参数的体系，推荐使用该力场。

Dreiding 基于杂化规则的力常数和几何结构参数。适用于计算有机、生物和主族无机分子的几何结构、构象能、分子间结合能和晶体堆积。

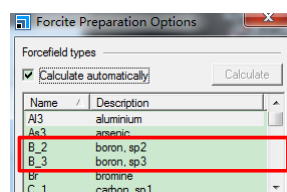
力场类型 (forcefield type)

又称势能类型，力场原子类型，或原子类型
力场类型给出了原子的局域微观化学环境本质。

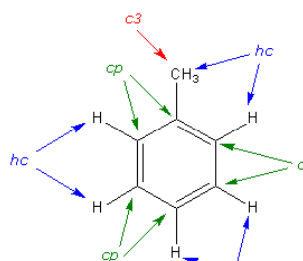
通常会涉及到：

- 元素
- 成键数目
- 键合原子数目、类型
- 杂化态
- 形式电荷

例如右图中，pcff力场下甲苯分子各原子的力场类型



Name	Description
Al3	aluminium
As3	arsenic
B_2	boron, sp2
B_3	boron, sp3
Br	bromine
C_1	carbon, sp1

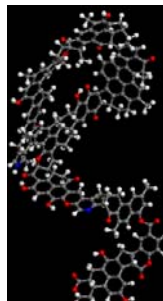


Forcite Plus是先进的分子力学和分子动力学模拟程序

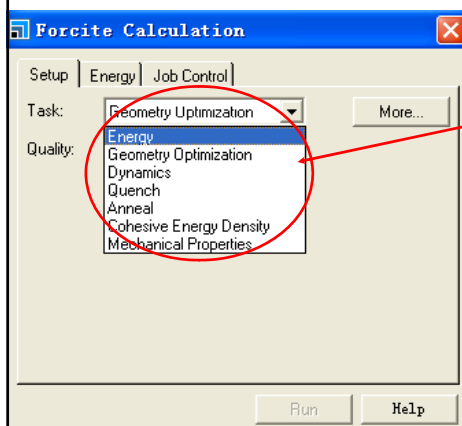
- 支持多种分子力场
- 对各种体系均适用
- 随着计算机软硬件的发展，近年来备受重视

其研究领域包括：

- 计算径向分布函数，取向关联函数和散射曲线
 - 测量距离、角度和旋转半径的分布
 - 给出特定成分的浓度曲线
 - 绘制温度、压力、体积、应力以及单胞参数
 - 给出分子力学和分子动力学模拟的势能及其组成项、动能和总能量值
 - 材料力学性质研究
 - 计算偶极相关函数
 - 大量分子体系的内聚能密度和溶解性参数
 - 对于估算自扩散系数的均方位移和速度相关函数
 - 在学习表中观察并绘制轨迹数据
- 按任意性质排序，如，按能量排序，找到最低 能量构型

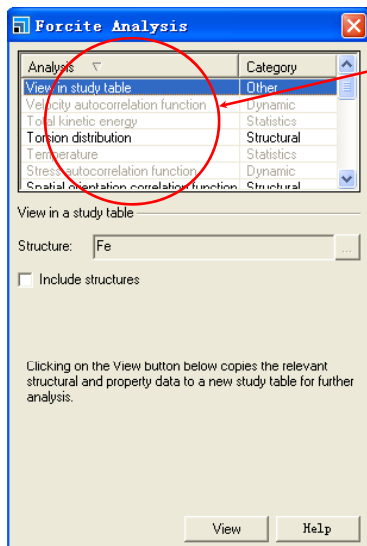


Forcite Plus: 基本任务



- 单点能计算
- 几何优化
- 动力学计算
- 淬火模拟
- 退火模拟
- 内聚能密度的计算
- 力学特性的计算

Forcite Plus : 各类性质分析



- 学习表中观察并绘制轨迹数据
- 速度相关函数
- 总动能
- 距离、角度和旋转半径分布
- 温度、压力
- 应力相关函数
- 取向关联函数
- 散射曲线
- 径向分布函数
- 势能项组成
- 均方位移
- 焓变
- 动态波动特征
- 偶极相关函数
- 密度、单胞参数
- 浓度分布曲线

培训内容

- **MaterialsStudio**
- 分子力学原理简介及MS Forcite Plus概述
- **MS Forcite Plus**参数设置技巧
- MS Forcite Plus应用实例
- MS Forcite Plus hands-on练习
- Q&A

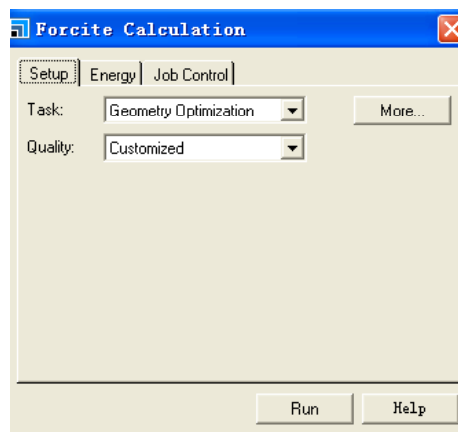
Forcite Plus的参数设置

Setup菜单

- 计算任务(Task)

单点能计算; 几何优化
; 动力学计算; 淬火模拟
; 退火模拟; 内聚能密度
的计算; 力学特性的计算

- 精度控制(Quality)



Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----

Geometry Optimization/More

- 算法(Algorithm)

精确算法(Smart); 最速下降法
(Steepest descent); 共轭梯度法(Conjugate
gradient); 牛顿法(Quasi-Newton);
ABNR法

- 精度控制(Quality)

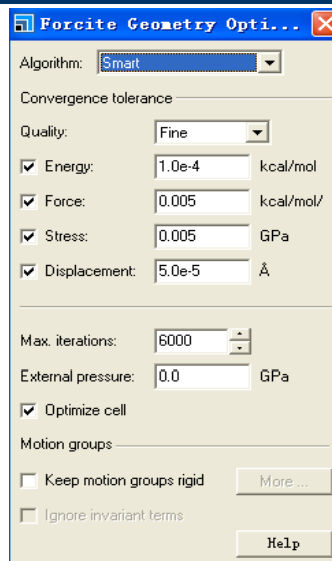
能量(Energy); 力(Force); 应力(stress); 位
置(Displacement)

- 模拟时间(max.iterations)

- 静态压力(external pressure)

- 优化单胞(optimize cell)

- 运动单元(Motion groups)

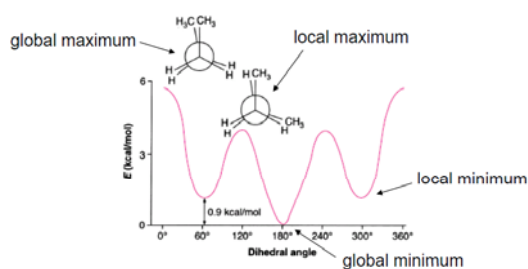


Solutions for discovery

Minimization

能量最小化 (Energy Minimization) , 或结构优化 (Geometry Optimization)
在势能面上定位能量极小点, 从而确定体系的低能结构。

- Smart
- Steepest descent
- Conjugate gradient
- Quasi-Newton
- ABNR



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



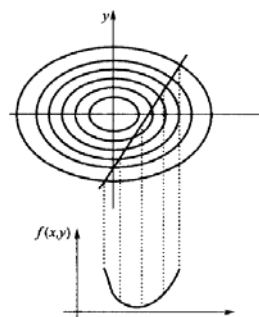
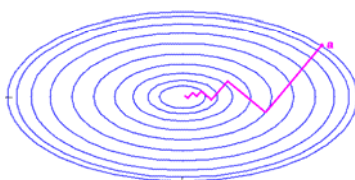
Solutions for discovery

Minimization

Steepest descent 最速下降法

在势能面上沿着能量下降的梯度方向进行线性搜索。在接近能量极小点时, 搜索的方向会发生震荡, 收敛较慢, 这是最速下降法的特性。

优化幅度大, 适合于偏离平衡位置很大的结构的优化。



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



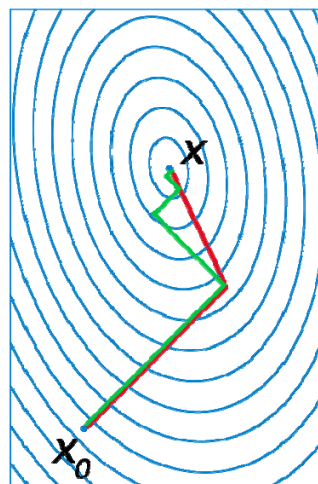
Minimization

Conjugate gradient 共轭梯度法

最速下降法中两次搜索的方向是正交的，这样效率不高。共轭梯度法则通过一定的算法使得两次搜索的方向是共轭的。

共轭梯度法收敛速度快，但容易陷入局域势阱，

适合于已经接近平衡位置的结构优化。



Minimization

Newton-Raphson 牛顿-拉弗森迭代法

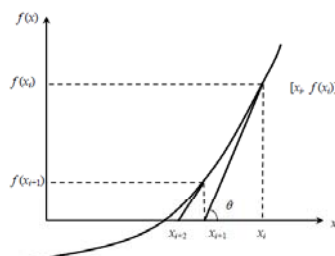
不仅通过梯度来确定搜索方向，同时采用曲率函数预测能量极小点。

计算量较大，当微商小时可以很快收敛。

- Quasi-Newton
- ABNR

对于分子体系进行结构优化，通常先采用最速下降法进行粗略的优化，然后再用共轭梯度或牛顿法进行更精细的优化

—— smart

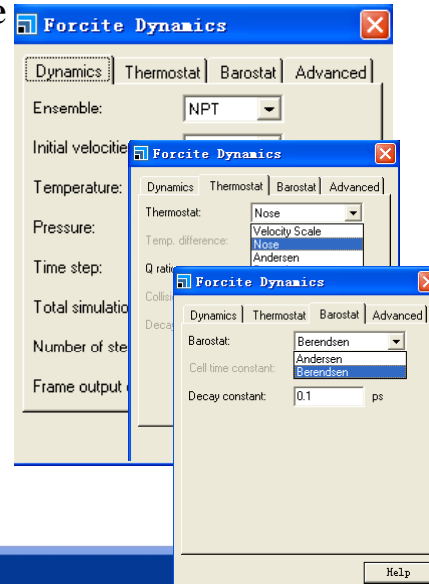


$f(x)=0$ 的初始猜测值为 x_i ，则切线与 x 轴的交点为一改进的猜测值，依次迭代至达到收敛标准。

Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----Dynamics/More

- 系统(Ensemble)
NVT, NPH, NVE, NPT
- 初始速度(Initial velocities)
任意的(Random); 当前的(current)
- 温度(Temperature)以及控温方法
速率法; Nose法; Andersen法;
Berendsen法
- 压力(pressure)以及控压方法
Andersen法; Berendsen法
- 时间步长(Time step)
- 总模拟时间(Total simulation time)
- 模拟步数(Number of steps)
- 每多少步输出运动单元(Motion groups)



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

系综

系综 (ensemble) : 一大群相类似的体系的集合。

为什么要采用系综?

对一类相同性质的体系, 其微观状态 (比如粒子的位置和速度) 仍然可以大不相同。 (实际上对于一个宏观体系, 所有可能的微观状态数是天文数字) 统计物理的一个基本假设 (**各态历经假设**) 是: 对于一个处于平衡态的体系, 物理量的时间平均, 等于对对应系综里所有体系进行平均的结果。体系的平衡态的物理性质可以对不同的微观状态求和来得到。

微正则系综(NVE)、等焓等压系综(NPH)、

正则系综(NVT)、等温等压系综(NPT)

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

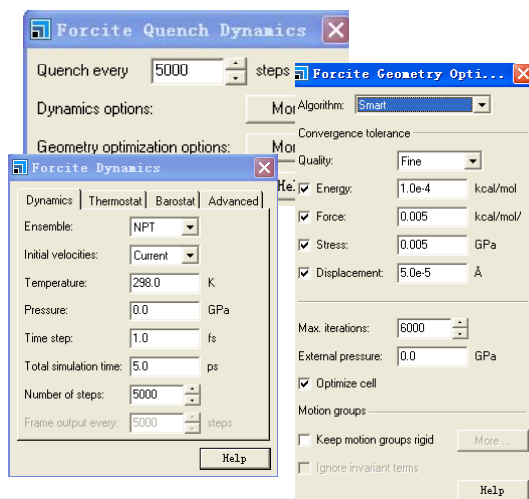
Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----Quench /More

- 淬火步数(Algorithm)
控制了MD中输出构象的步数
- 动力学选项
- 几何优化选项

淬火模拟指的是
每进行一次MD，
则进行一次几何
优化

灰色



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

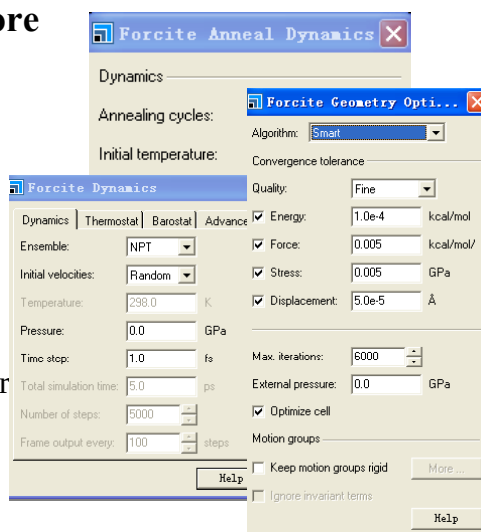
创腾科技有限公司

Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----Anneal /More

- 退火循环数(Algorithm)
- 初始温度(Initial temperature)
- 中间循环温度(Mid-cycle temperature)
- 初始温度与中间循环温度之间取得温度点个数
- 每个温度点动力学模拟步数
- 总的模拟步数 (Total number of steps)
- 几何优化

灰色



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

创腾科技有限公司

Forcite Plus的参数设置

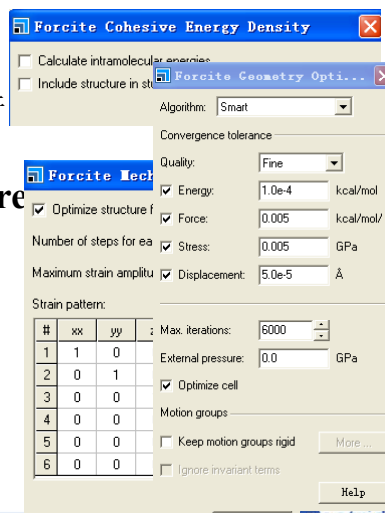
Setup菜单-----Cohesive Energy Density/More

- 计算分子内相互作用
输出Study Table文件
- Study table中包括输入的结构文件

Setup菜单-----

Cohesive Energy Density/More

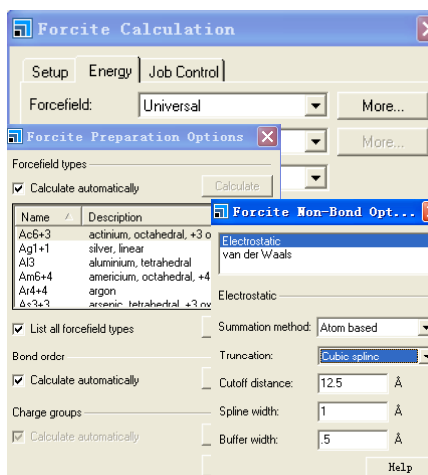
- 优化结构
- 明确应变模式中产生的应变数目
推荐使用偶数值 (2-100)
- 指出结构最大的形变
值在0.001-0.1之间较为合理
- 应变模式(Strain Pattern)
应变张量矩阵, 由结构对称性决定



Forcite Plus的参数设置

Energy 菜单

- 力场(Forcefield)
Dreiding; Universal; COMPASS26/27;
COMPASS; CVFF; PCFF; PCFF30;
Browse...
- 电荷(charges)
Use current (默认); 电荷平衡算法(Charge using QEq); Charge using Gasteiger
- 精度(Quality)—加和方法精度
- 加和方法(Summation method)
静电相互作用; 非键相互作用
原子截断(Atom based); 电荷组截断(Group based); Ewald截断



非键截断

非键截断： 计算范德华和静电作用能时
考虑体系中所有原子相互作用计算量庞大
原子间距增加范德华和静电作用能减小很多
提高计算效率

非键截断函数：

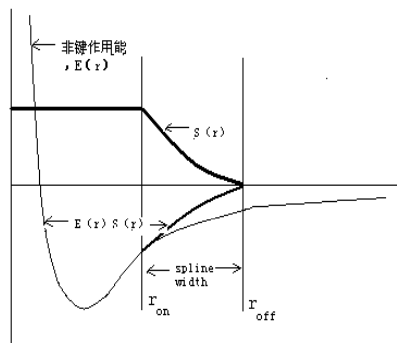
$$E_{elec} = \sum_r E_{elec}(r) S(r_{on}, r_{off})$$

$$E_{vdw} = \sum_r E_{vdw}(r) S(r_{on}, r_{off})$$

$r \leq r_{on}$ 时, $S=1$

$r_{on} \leq r \leq r_{off}$ 时, E 逐渐平滑下降到 0

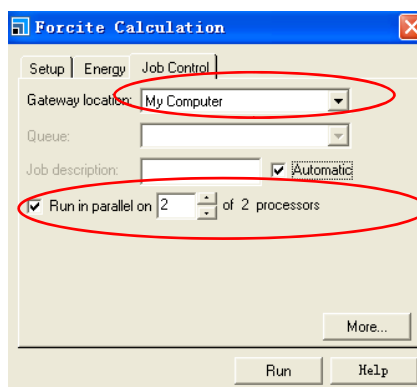
$r \geq r_{off}$ 时, $S=0$



非键作用能截断函数

Forcite Plus的参数设置

Job Control菜单



服务器-客户端运行模式可以方便地将作业提交到局域网上任何一台适合的工作站或服务器上进行运算。

Forcite Plus模块支持多CPU并行计算并有很好的并行计算效率

培训内容

- MaterialsStudio及MS Forcite Plus概述
- 分子力学原理简介
- MS Forcite Plus参数设置技巧
- **MS Forcite Plus应用实例**
- Q&A

交联环氧树脂的结构与性质关系

BHP Steel、RMIT University

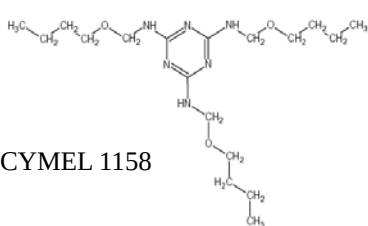
交联环氧树脂可以作为钢铁上的底漆，BHP钢铁公司希望能够深入了解环氧树脂的**结构/性能**之间的关系，从而设计出具有更好阻隔性能，同时与钢铁基底结合更紧密的交联材料。

RMIT大学和BHP钢铁公司合作，使用Accelrys公司的分子模拟软件，**考察了环氧树脂在不同固化剂作用下的交联**，并得到了相关的**交联密度**以及发生**交联反应的位点数目**等信息。

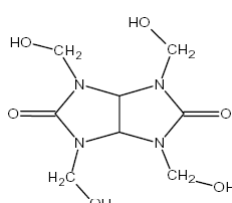
此外，树脂在固化过程中的**收缩情况**也得到了重现，并估计了交联树脂的**阻隔性能**以及**树脂与基底的相互作用强弱**。

Polymer 43, (2002),963-969

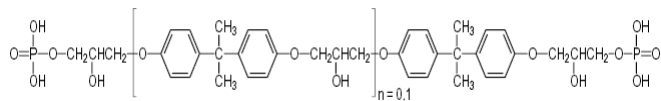
Solutions for discovery



CYMEL 1158



CYMEL 1172



环氧树脂 P0 (n=0), P1(n=1)

Table 1
Parameters of the simulated systems and the crosslink density obtained

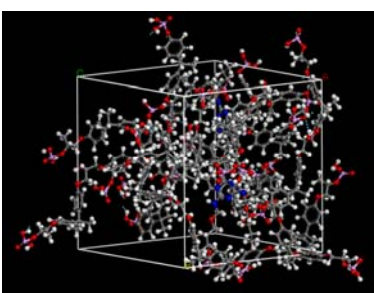
System	Resin/crosslinker weight ratio	Resin/crosslinker mole ratio	
P0 + 1158	78:22	12:2	0
P1 + 1158	79:21	8:2	70
P1 + 1172	85:15	10:5	50

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

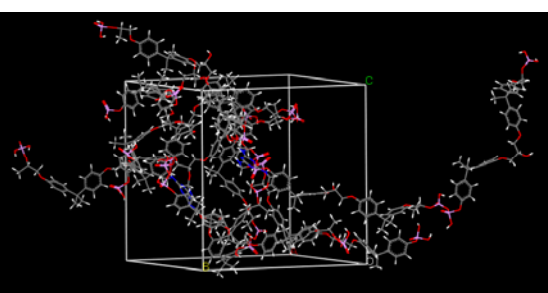


Solutions for discovery

交联后的体积收缩



Before



After

Table 2
Percentage volume reduction and final density in the simulated systems following the NPT MD

System	Volume reduction (%)	Density (g/cm ³)
P0 + 1158	12.03	1.24
P1 + 1158	5.30	1.19
P1 + 1172	5.35	1.24

交联密度越大，越致密。P1+1172交联密度大且体积收缩小

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



交联树脂的阻隔性能

Solutions for discovery

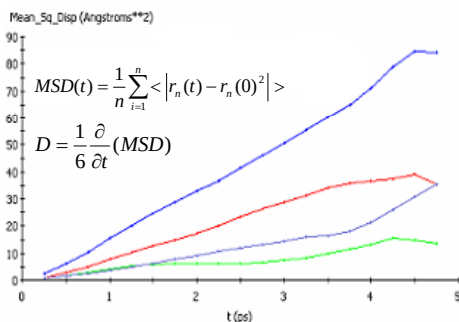
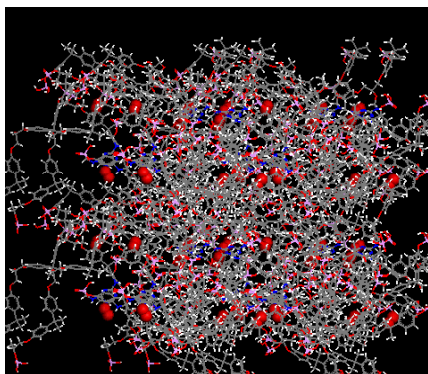


Table 3

Diffusion constants of water and oxygen in the simulated systems, ($\times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$)

System	Molar fraction of water in water/oxygen systems (%)	Water		Oxygen	
		Pure water	Water/oxygen	Pure oxygen	Water/oxygen
P0 + 1158	58	4.62	4.47	3.32	2.17
P1 + 1158	60	4.13	1.13	3.35	0.43
P1 + 1172	54	2.13	0.9	4.00	0.8

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

创腾科技有限公司

与基底的结合能力

Solutions for discovery

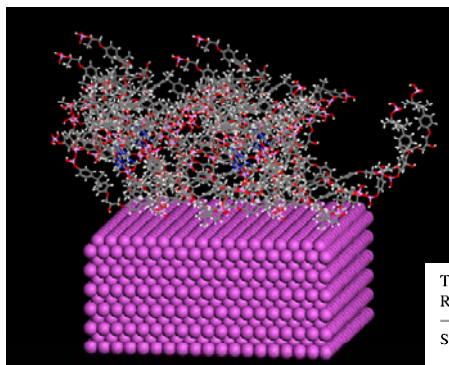


Table 4

Relative difference in the work of adhesion in the simulated systems

System	Number of hydroxyls per unit surface area ($\text{\AA}^2$) ($\times 10^3$)	Relative difference in work of adhesion (J/m^2)
P0 + 1158	4.6	0.11
P1 + 1158	3.6	0.0
P1 + 1172	5.2	0.67

由于P1分子比P0要大，所以更难与交联剂发生缩聚反应，从而保留更多的羟基，更容易与金属发生相互作用

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

创腾科技有限公司

结 论

通过模拟，能够得到以下关键信息：

- 交联密度和未反应交联位点数目。对于性能设计非常重要。
- 交联树脂的收缩率。与潜在涂层材料的合成和环境性能关系密切。
- 阻隔性能。对于考察防腐涂层的性能非常关键。
- 粘附能力。涂层设计的重要指标。

Polymer 43, (2002),963-969

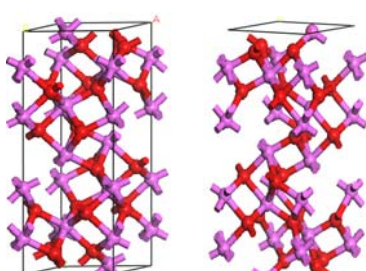
练习： 聚合物和金属表面的相互作用

总体流程

- 构造表面并优化
- 增大表面面积并改变周期性
- 聚合物模建
- 使用分层模建工具将聚合物加入到表面上
- MD优化层结构
- 计算相互作用能

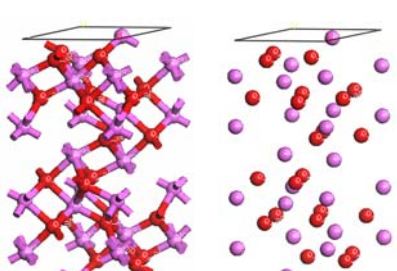
Solutions for discovery

构造表面



Al₂O₃ 晶胞 Al₂O₃ 0 0 -1

优化表面



注意：由于在力场设定中，将no-bond cut-off值设置为12.5mA，所以表面的深度必须要大于12.5mA。

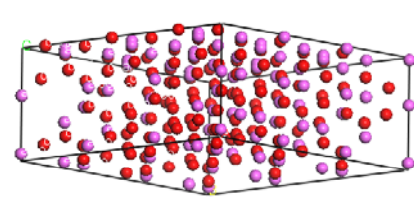
注意：COMPASS力场在对模型分配力场(typing)的时候需要Al原子和O原子之间有键存在，然而，要对体系进行正确计算，需要在分配好力场后将Al-O键删除。

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

neotrident
创腾科技有限公司

Solutions for discovery

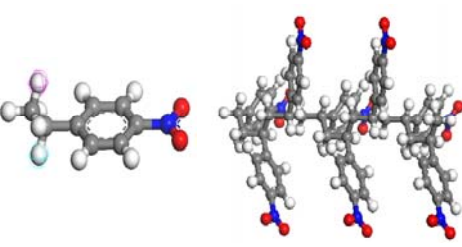
增大表面积，改变周期性

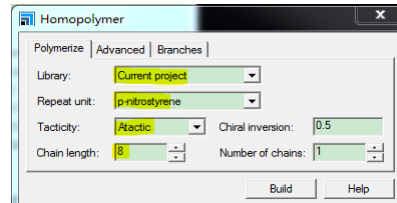


C:\Program Files (x86)\Accelrys\Materials Studio 6.1\share\Structures\repeat-units\vinyls\styrene

按下工具栏上绘制片断工具的下拉箭头，选中Fragment Browse。在Functional Groups中选择Nitro。在与乙烯基相对的位置单击一次加入硝基基团

聚合物建模

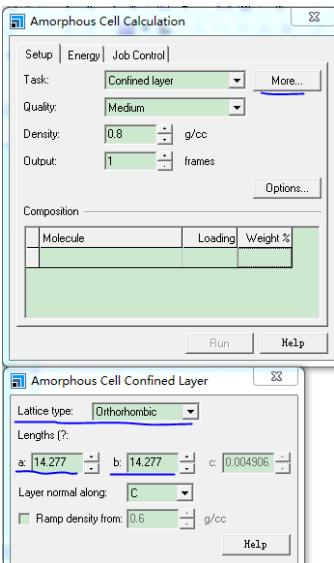


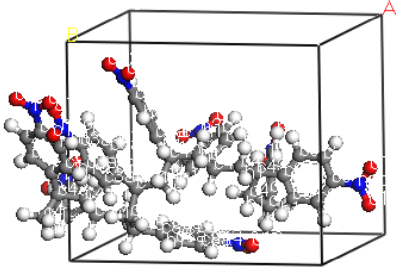


创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

neotrident
创腾科技有限公司

Solutions for discovery





创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

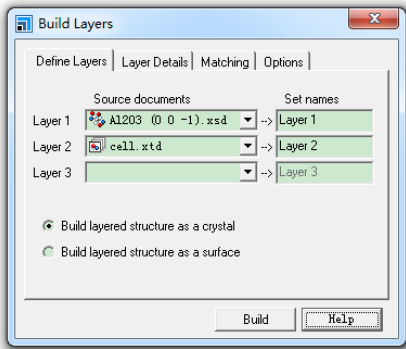
neotrident
创腾科技有限公司

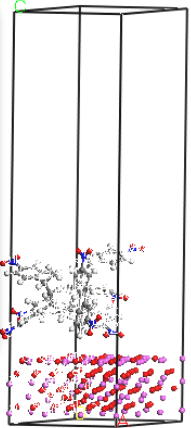
Solutions for discovery

•使用分层模建工具将聚合物加到表面上

注意：首先需要确保单胞内和表面上的聚合物具有相同的力场类型。方法
for cite / energy / more 中点击 calculate

选择Layer Details标签部分。将Layer2的真空层加到30.0。





创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

neotrident
创腾科技有限公司

•优化层结构并运行动力学计算

•计算相互作用能

$$E_{\text{Interaction}} = E_{\text{total}} - (E_{\text{surface}} + E_{\text{polymer}})$$

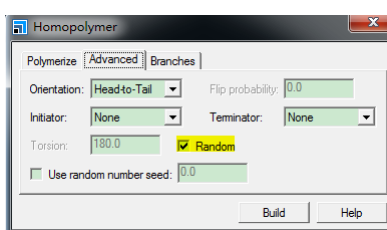
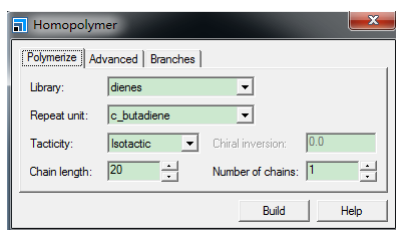
E_{total} 是表面和聚合物的总能量, E_{surface} 是除去聚合物后表面的能量, E_{polymer} 是除去表面后聚合物的能量。

注意计算能量时取消所有的原子的固定
在输出文档中查找**Total Energy** (总势能)

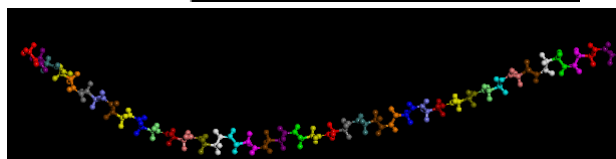
练习：气体在聚合物中的扩散

气体在有机溶剂, 聚合物或沸石中的扩散率可以通过分子动力学模拟来计算气体在材料中的均方位移得到

1 建立并优化一个甲烷分子和PBD聚合物

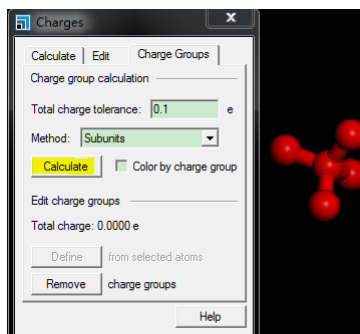
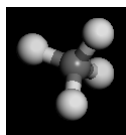


标记为charge group



Solutions for discovery

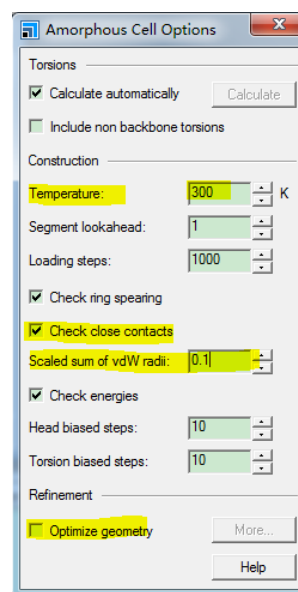
对甲烷设置charge group



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



Solutions for discovery

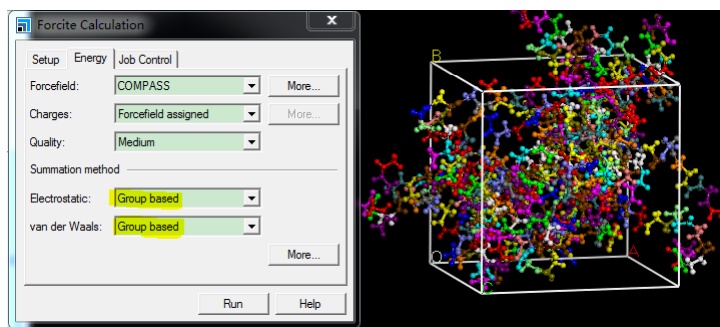


创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



Solutions for discovery

Forcite进行结构优化

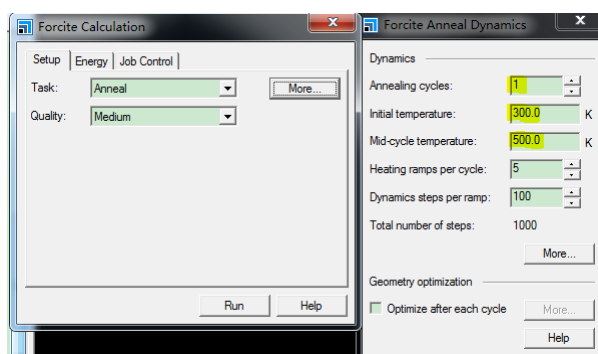


创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



Solutions for discovery

对优化后的结构进行退火模拟找到低能构型



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



Solutions for discovery

运行动力学计算，平衡结构

Forcite Calculation

Setup | Energy | Job Control

Task: Dynamics More...

Quality: Medium

Restart

☐ Restart ☐ Append to current trajectory

Run Help

Forcite Dynamics

Dynamics | Thermostat | Barostat | Advanced

Ensemble: NVT

Initial velocities: Random

Temperature: 300.0 K

Pressure: 0.0 GPa

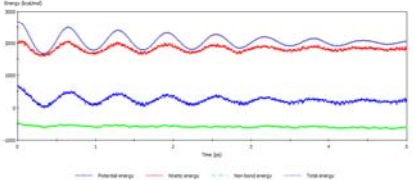
Time step: 1.0 fs

Total simulation time: 5.0 ps

Number of steps: 5000

Frame output every: 500 steps

Help



Energy (kcal/mol)

Time (ps)

Legend: Potential energy, Kinetic energy, Total energy

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)


 创腾科技有限公司

Solutions for discovery

对动力学平衡后的结构进行动力学计算，得到轨迹文件

Forcite Calculation

Setup | Energy | Job Control

Task: Dynamics More...

Quality: Medium

Restart

☐ Restart ☐ Append to current trajectory

Run Help

Forcite Dynamics

Dynamics | Thermostat | Barostat | Advanced

Ensemble: NVE

Initial velocities: Random

Temperature: 300.0 K

Pressure: 0.0 GPa

Time step: 1.0 fs

Total simulation time: 50.0 ps

Number of steps: 50000

Frame output every: 500 steps

Help

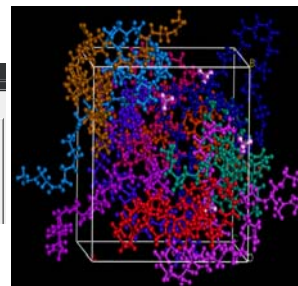
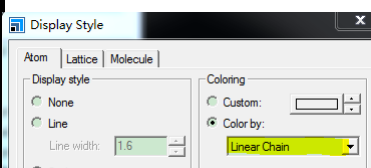
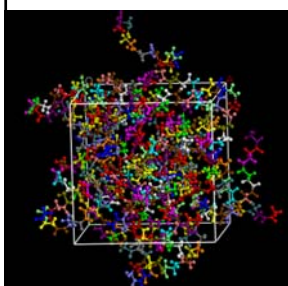
创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)


 创腾科技有限公司

Solutions for discovery

将所有的甲烷分子定义为一个set，使用Forcite plus 分析工具分析均方根位移 mean squared displacement，据此得到扩散系数

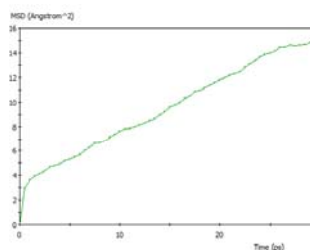
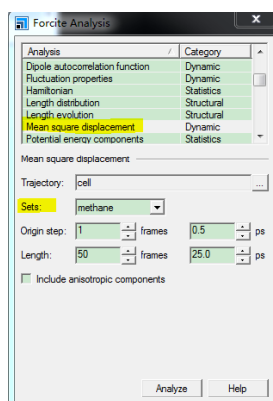
为了使甲烷可以突出显示，便于定义set，需要对显示方式进行调整。方法为display style—color by ---linear chain



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



Solutions for discovery



$$D_{\alpha} = \frac{1}{6N_{\alpha}} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^{N_{\alpha}} \left\langle \left[r_i(t) - r_0(t) \right]^2 \right\rangle$$

$$D = a^2/6\tau$$

在实际计算中，你要检查计算结果是否可靠。你可以画出log(MSD)对log(time)的曲线。如果你的计算收敛了，那么你将得到一条直线

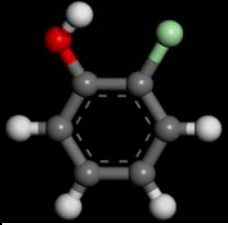
创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



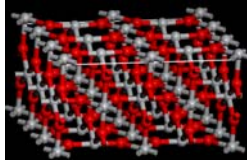
Solutions for discovery

发现分子在一个表面的低能构型

练习目的： 确定采用MD和几何优化来寻找最低能量构型

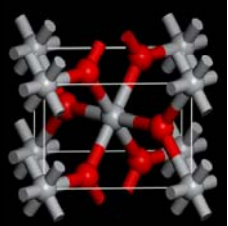


chlorophenol

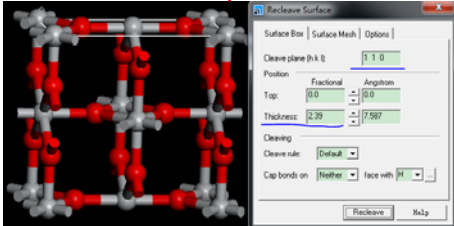


固定底层，优化结构，并根据分子大小确定表面超晶胞的构建3*2

优化结构
参数设定
力场：COMPASS
Summation method:
atom based



TiO2-rutile



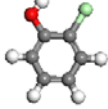
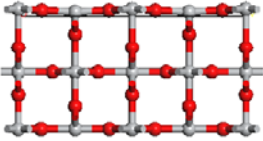
优化结构——切表面

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

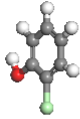
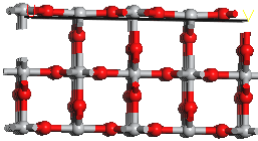
neotrident
创腾科技有限公司

Solutions for discovery

平衡分子在表面上的结构

结构优化

用quench来抽取构象

采用分子动力学来研究分子与表面相互作用时，需要固定表面原子。

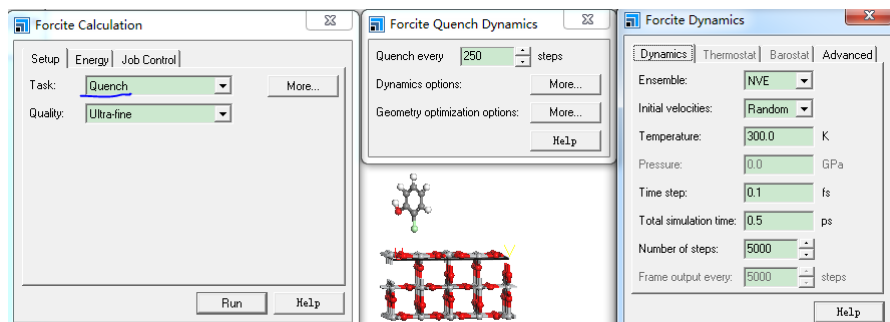
创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

neotrident
创腾科技有限公司

Solutions for discovery

用quench来抽取构象

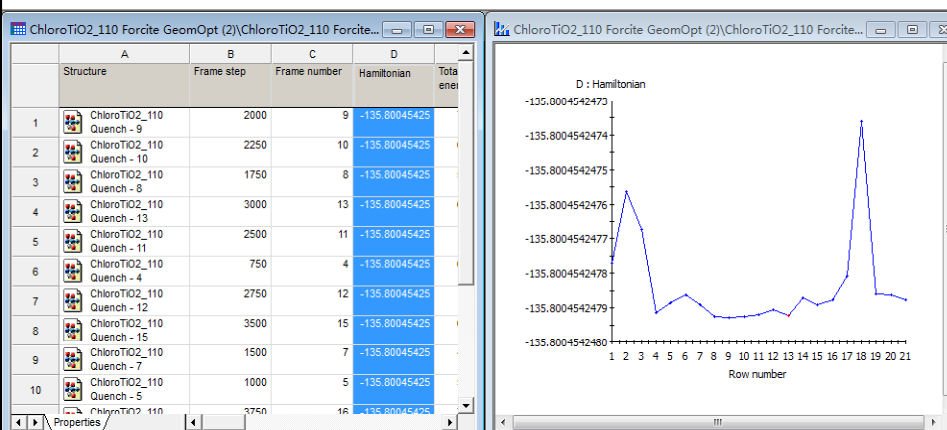
采用分子动力学来研究分子与表面相互作用时，需要固定表面原子。



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



Solutions for discovery



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

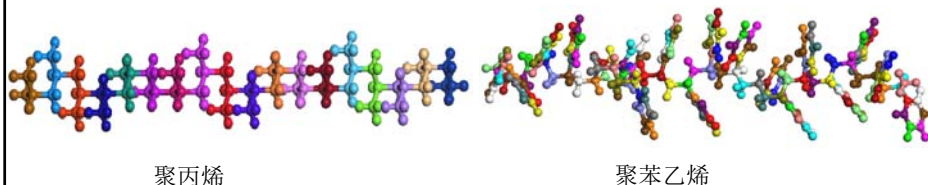


练习：计算两个聚合物之间的可溶性

聚合物共混以希望得到优于聚合物本身任意组分的特征。MS软件可以用来确定许多聚合物的溶解度参数，内聚能密度Flory-Huggins相互作用参数

本例进程

- 1 构建两个聚合物：聚苯乙烯和聚丙烯
构建模型使用模块：visualizer



Build | Build Polymers | Homopolymer

构建聚丙烯 Library : olefins Repeat unit: propylene, Chain length: 18. Tacticity: Syndiotactic

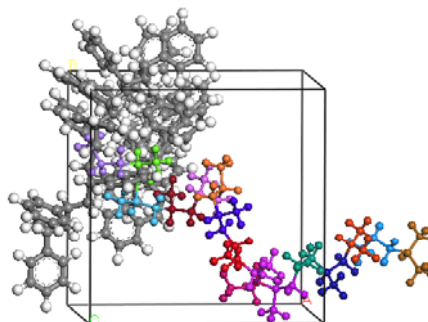
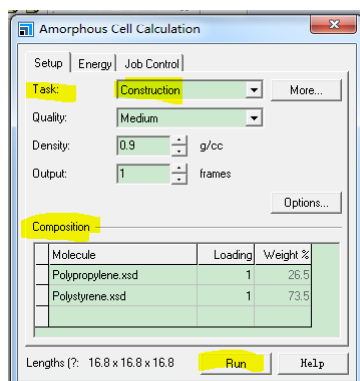
构建聚苯乙烯 Library : vinyls , Repeat unit : styrene

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



练习：计算两个聚合物之间的可溶性

- 2 优化两个聚合物 Forcite plus/task/geometry
- 3 构建无定形共混单胞并进行优化 Amorphous Cell | Calculation+forcite plus/geometry optimization



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

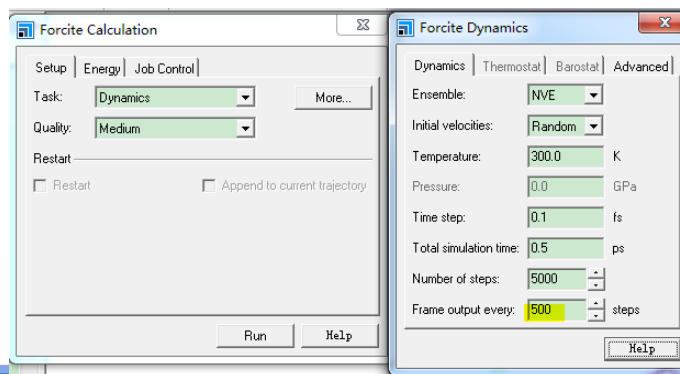


练习：计算两个聚合物之间的可溶性

4 平衡晶胞

搭建好的无定型结构存在真空区，因此对搭建好的无定型结构进行能量最小化和MD计算，此过程称之为松弛结构。

5 进行动力学计算得到平衡轨迹文件



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

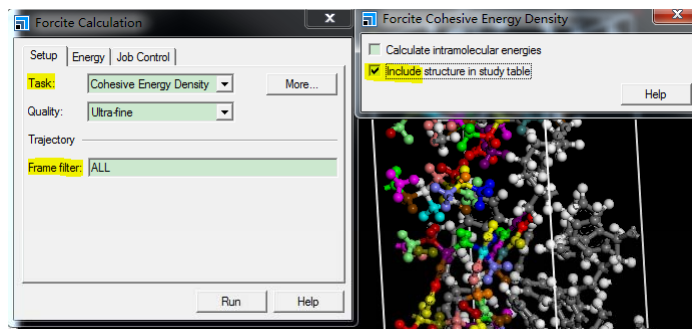
创腾科技有限公司

练习：计算两个聚合物之间的可溶性

6 计算内聚能密度

一旦得到了平衡的轨迹文件，可以计算其内聚能密度

激活平衡轨迹文件，进行内聚能密度计算

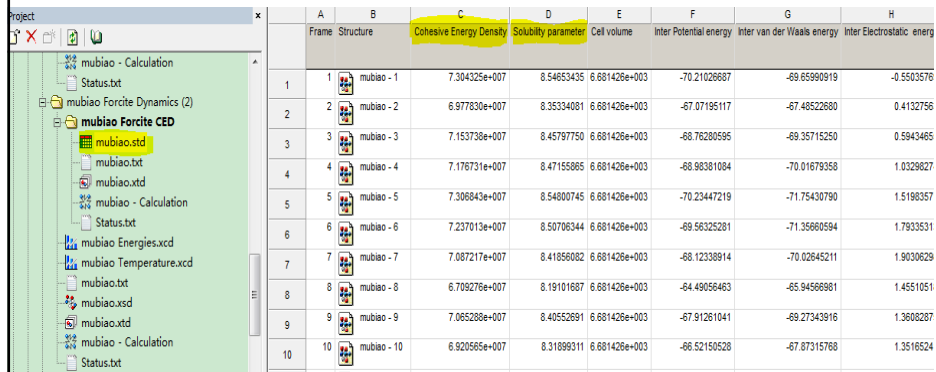


创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

neotrident
创腾科技有限公司

练习：计算两个聚合物之间的可溶性

6 得到内聚能密度计算结果



	A	B	C	D	E	F	G	H
	Frame	Structure	Cohesive Energy Density	Solubility parameter	Cell volume	Inter Potential energy	Inter van der Waals energy	Inter Electrostatic energy
1	1	mubiao - 1	7.304325e+007	8.54653435	6.681426e+003	-70.21026687	-69.65990919	-0.5503576
2	2	mubiao - 2	6.977830e+007	8.35334081	6.681426e+003	-67.07195117	-67.48522680	0.4132756
3	3	mubiao - 3	7.153738e+007	8.45797750	6.681426e+003	-68.76280595	-69.35715250	0.5943465
4	4	mubiao - 4	7.176731e+007	8.47155865	6.681426e+003	-68.98381084	-70.01679358	1.0329827
5	5	mubiao - 5	7.306843e+007	8.54800745	6.681426e+003	-70.23447219	-71.75430790	1.5198357
6	6	mubiao - 6	7.237013e+007	8.50706344	6.681426e+003	-69.56325281	-71.35660594	1.7933531
7	7	mubiao - 7	7.087217e+007	8.41856082	6.681426e+003	-68.12338914	-70.02645211	1.9030629
8	8	mubiao - 8	6.709276e+007	8.19101687	6.681426e+003	-64.49066463	-65.94568981	1.4551051
9	9	mubiao - 9	7.065288e+007	8.40552691	6.681426e+003	-67.91261041	-69.27343916	1.3606287
10	10	mubiao - 10	6.920565e+007	8.31899311	6.681426e+003	-66.52150528	-67.87315768	1.3516524

混合能与共混体系和纯组分的内聚能密度有关：

$$\Delta E_{mix} = \varphi_A \left(\frac{E_{coh}}{V} \right)_A + \varphi_B \left(\frac{E_{coh}}{V} \right)_B - \left(\frac{E_{coh}}{V} \right)_{mix}$$

φ_A 和 φ_B 表示体系中A 和B 的体积分数

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



培训内容

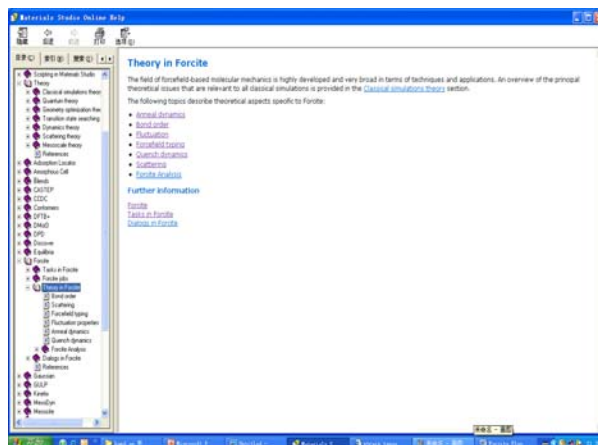
- MaterialsStudio及MS Forcite Plus概述
- 分子力学原理简介
- MS Forcite Plus参数设置技巧
- MS Forcite Plus应用实例
- MS Forcite Plus hands-on练习
- Q&A

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



帮助文档

在线帮助文档从原理到操作再到参考文献一应俱全



创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



我们的技术支持帐号

Question@neotrident.com

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)



Solutions for discovery

关注我们的网站

www.neotrident.com



报名参加各类相关的网络讲座及高级培训班

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

neotrident
创腾科技有限公司

Solutions for discovery

其他问题

?

创腾科技有限公司 (NeoTrident Technology Ltd.)

neotrident
创腾科技有限公司

