

Petrochemistry & Catalysis

石化催化 研究设计解决方案

全功能材料设计及性质预测平台MedeA



Petrochemistry
& Catalysis

关于源资科技

源资信息科技（上海）有限公司于公元2008年5月在上海交通大学产学合作的白猫科技园区内正式成立，并隶属于上海张江国家自主创新示范区的长宁分园。公司已于2015年通过ISO9001质量体系认证，于2018年荣获“高新技术企业称号”，于2020年荣获“专精特新中小企业称号”。

公司以协助国内材料、化工、医药等领域的事业发展为宗旨，以创新的理念，为材料模拟、制药研发、临床试验设计及信息和质量管理等各个领域提供连贯整合性平台解决方案。自成立之日起，公司积极组织参与材料相关领域的各种学术交流活动，以技术培训班、研讨会、在线教育、展会报告等多种方式，不断将世界范围内更新的理念，更优秀的解决方案引进中国。公司成立至今，受到了教育、学术和企业界人士的广泛肯定和赞赏。

公司于2013年9月1日正式取得Materials Design®公司VASP及MedeA软件的独家代理权。公司将为国内材料信息学这个新兴领域的科研工作者提供最大的支持和最优质的服务，帮助科研工作者们只专注于科学研究。

关于Materials Design®

Materials Design®公司由材料科学领域的知名带头人Paul Saxe博士创建于1998年，总部位于美国，并在欧洲和澳大利亚设有分公司，能够给予用户全球化的视角和快速响应的服务。

Materials Design®公司致力于将计算材料科学与实验中获得的结构数据库整合成一个全功能材料设计与性质预测平台，结合学术界中最权威的第一性原理、分子动力学、蒙特卡洛和半经验量化这几种计算方法为解决材料设计、化工生产、工业应用、基础研究等几大领域中实际存在的科学与工程问题提供了便利。目前，致力于推动计算材料科学的公司不多，Materials Design®公司作为其中之一，利用强大的数据库与计算模拟方法，帮助提升已有材料的国际竞争力，同时探索和开发新材料。Materials Design®公司旨在与全球范围内学术及工业界紧密合作，共同为人类的未来生活提供更好的材料。

The Gateway to Atom-Scale Simulation ▶▶▶

石化催化研究设计解决方案

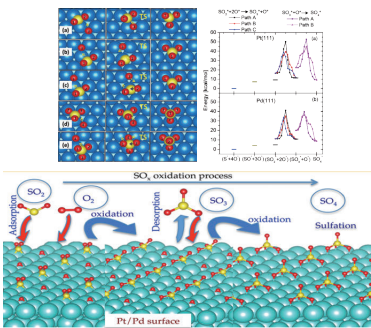
MedeA是一个全功能材料设计及性质预测平台软件，其中包含数据库，建模工具，多尺度计算引擎，多种理化性质预测工具等模块。

- 数据库：包含ICSD、Pearson、NCD、COD等多种数据库。
- 建模工具：能够创建分子、表面、吸附、分子筛、掺杂缺陷、聚合物、重油体系、纳米材料等结构。
- 计算引擎：包含量子力学VASP、分子动力学LAMMPS、蒙特卡洛GIBBS、半经验量化MOPAC。
- 性质预测：吸附脱附、化学反应/扩散、电子性质、结构稳定性、力学热力学、粘度等。
- 高通量计算：通过批量计算对催化材料进行高通量筛选设计。



MedeA在石化催化研究中的应用：贵金属/过渡金属催化剂

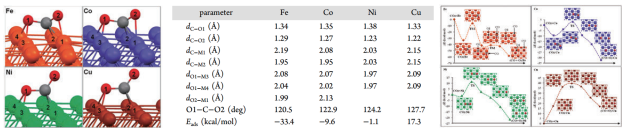
◉ 贵金属催化剂（Pt、Pd）脱硫反应机理研究



MedeA VASP： 对Pt(111)和Pd(111)贵金属催化剂表面上SOx进行优化，找到初态、末态结构。
MedeA VASP + MedeA TSS： 分析SO2*氧化及SO3*氧化的主要反应途径，而且发现只有当SO2*或SO3*迁移至O原子附近推动氧化反应发生时，反应能垒最低。

*参考文献：H. N. Sharma, et al. J. Phys. Chem. C, 2014, 118(13): 6934-6940.

◉ 过渡金属(Fe、Co、Ni、Cu)表面还原CO2

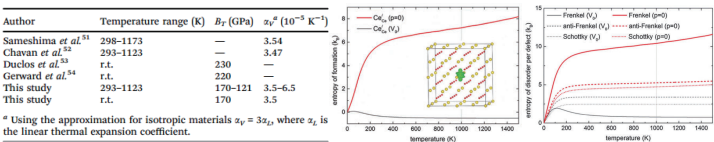


MedeA VASP： 计算CO2分子在Fe、Co、Ni及Cu的(100)表面吸附，优化初态、末态结构。分析CO2在各个表面的电荷转移，吸附体系中大部分电荷转移朝向C原子。

MedeA VASP + MedeA TSS： 分析CO2在不同金属体系表面解离反应机理并计算反应能垒。Fe(100)表面，有2个过渡态；Co、Ni和Cu(100)表面只有一个过渡态；CO2/Fe的第一步反应能垒较高，Co、Ni fcc(100)表面上更适合CO2解离还原反应。

*参考文献：Cong Liu, et al. J.Phys.Chem.C. 2012, 116, 5681-5688.

◉ 氧化铈不同缺陷形成熵第一性原理研究

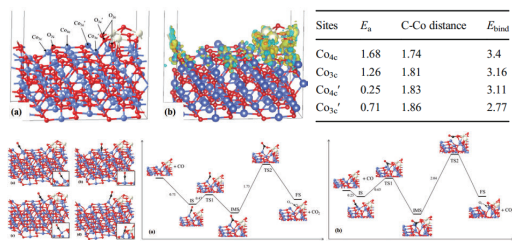


MedeA VASP： 计算不同类型缺陷和掺杂的CeO2结构，考察稳定性。
MedeA VASP + MedeA MT： 预测不同缺陷CeO2结构的体模量、热膨胀系数及其导数等力学性质。
MedeA VASP + MedeA Phonon： 预测不同缺陷CeO2结构的声子色散曲线，考察稳定性。

*参考文献：Steffen Grieshammer, et al. Phys. Chem. Chem. Phys. 2013,15, 15935-15942.

MedeA在石化催化研究中的应用：复合催化剂

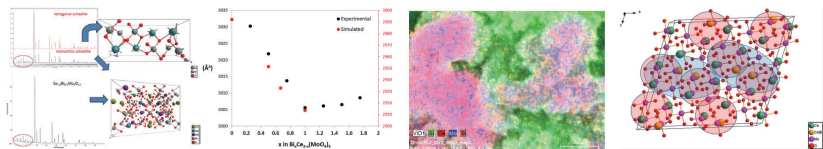
CO在CeO₂/Co₃O₄催化剂上氧化研究



MedeA VASP：计算CO在Ce₃O₆/Co₃O₄(110)表面上不同吸附位点，并分析Ce₃O₆/Co₃O₄(110)电荷再分布。
MedeA VASP + MedeA TSS：重点分析界面处CO与O_{2c}和O_{3c'}反应路径在Ce₃O₆/Co₃O₄(110)表面上，CO分子更倾向于直接形成CO₂，而不是吸附在Co_{3c}和Co_{4c'}位点上。

*参考文献：Structural Chemistry. 32, 799-804(2021).

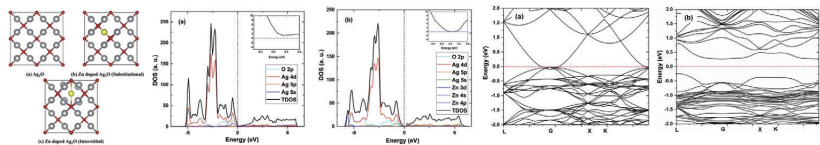
钼酸铋铈选择性丙烯氨氧化催化剂表征



MedeA VASP：实验通过X射线衍射图谱得到Bi_{0.5}Ce_{1.5}Mo₃O₁₂组成，通过MedeA InfoMaticA构建结构，随后采用MedeA VASP分析一系列Bi_xCe_{2-x}Mo₃O₁₂(0≤x≤2)晶胞参数及体积变化，理论与实验结合分析，得到具有钼酸铈结构的钼酸铋-铈酸铋固溶体中丙烯氨氧化的具体活性位点。

*参考文献：James F. Brazdil, et al. Applied Catalysis A: General 495 (2015) 115–123.

纳米催化剂Ag₂O中掺杂Zn的带隙研究

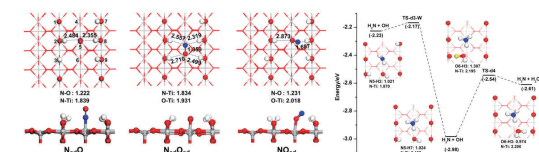


MedeA VASP：实验采用水热共沉淀法制备了Zn掺杂Ag₂O纳米粒子，随后采用第一性原理分析Ag₂O超胞结构、Zn在Ag₂O中取代Ag结构（M1）及Zn掺杂在Ag₂O超胞间隙位置（M2）结构稳定性，发现M2间隙掺杂Zn更有利，与实验结果一致。同时采用MedeA VASP对Ag₂O各掺杂结构进行电子性质分析，计算发现Ag₂O中间隙掺杂Zn，带隙明显拓宽，能带结构拓宽幅度与DOS图相似。对比掺杂前后的DOS发现，价带从pure Ag₂O的~6eV扩展到~7eV，提高了其在甲基橙光降解反应中的催化活性。

*参考文献：Arup Kumar De. et. al. Journal of Alloys and Compounds 832 (2020) 154127

MedeA在石化催化研究中的应用：光/电催化

羟基化TiO₂(110)表面上NO→NH₃+H₂O反应机理研究

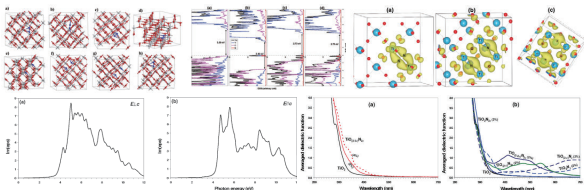


MedeA VASP：计算NO分子在羟基化TiO₂(110)表面上不同吸附结构。

MedeA VASP + MedeA TSS：重点分析了稳定吸附结构NadO和NadOad在TiO₂(110)面上的反应路径，总催化反应分成两步，第一步NO分子被活化，在羟基化TiO₂(110)面上反应生成HN+O和HNOH中间体；第二步反应生成最后产物NH₃和H₂O。

*参考文献：Wei-Hai Fang, et al. J. Phys. Chem. C, 2017,121,16373-16380.

N掺杂锐钛矿TiO₂光学性质的第一性原理研究



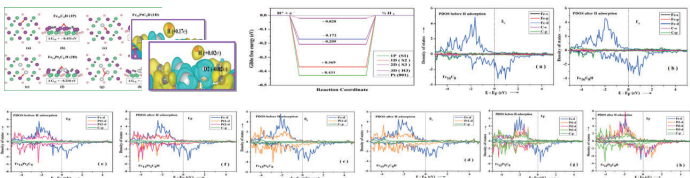
MedeA Environment：采用Supercell Builders构建TiO₂超晶胞模型，通过Substitution Search和Find Empty Space功能构建了八种不同浓度N原子掺杂到TiO₂中模型。

MedeA VASP：计算不同浓度N原子掺杂到TiO₂中结构稳定性，分析未掺杂及N掺杂TiO₂电子态密度、电荷密度及对UV-vis紫外可见光的光响应性能。

MedeA VASP + MedeA Phonon：计算TiO₂材料的声子能量，并由介电函数的虚部对应声子能量的变化预测出较好的光吸收模式。

*参考文献：M. Harb, et al. J. Phys. Chem C, 2011, 115, 19394-19404.

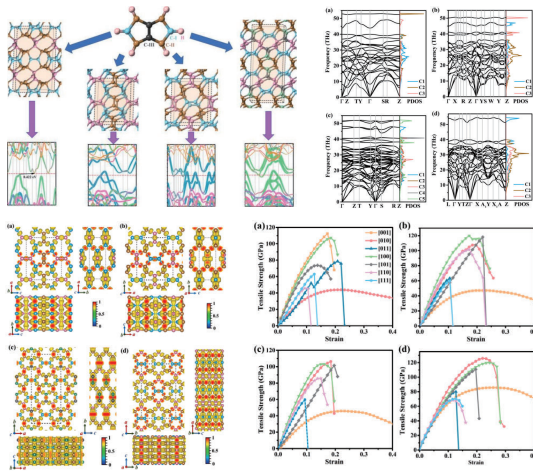
铂掺杂碳化铁析氢反应研究



MedeA VASP：计算Pt掺杂Fe₂C(001)表面上析氢反应（HER）的催化活性。在Pt/Fe₂C(Fe₁₃Pt₃C₈)空穴处获得了最佳的HER活性，表明Fe₁₃Pt₃C₈表面更有可能形成H₂。Bader电荷分析显示了衬底和吸附H原子之间的电荷转移；态密度（DOS）揭示了Pt/Fe₂C材料的磁性和金属性质，另外Fe₁₃Pt₃C₈中H-H键长度的延长促进了H₂的吸附和活化。

*参考文献：International Journal of Hydrogen Energy. 45(56) 2020, 31825-31840.

金属和半导体碳同素异形体组成戊搭烯骨架



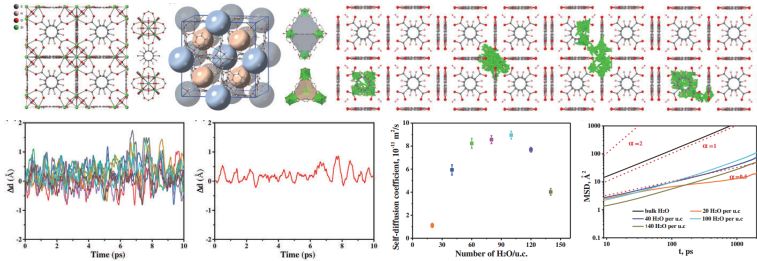
MedeA VASP: 构建superpentapentene-I、superpentapentene-II、superpentapentene-III 及superpentapentene-IV不同构型，考察体系稳定性。

MedeA VASP + MedeA MT: 计算四种superpentapentene构型的弹性常数、弹性模量及硬度等力学性质。

MedeA VASP + MedeA Phonon: 预测不同构型的声子色散曲线，考察稳定性。

*参考文献: Wei Zhang, et al. *Diamond & Related Materials* 109 (2020) 108063.

水在UiO-66 Zr-MOFs中扩散、氢键网络和约束效应研究



MedeA Environment: 参考实验合成羟基化UiO-66, 创建羟基化无缺陷UiO-66晶胞及UiO-66 Zr-MOFs结构。

MedeA VASP-AIMD: 用量子力学-分子动力学分析H₂O簇在四面体笼中运动，7-H₂O簇在四面体笼中非常稳定，在10ps轨迹中，水团簇在初始位置附近轻微波动。

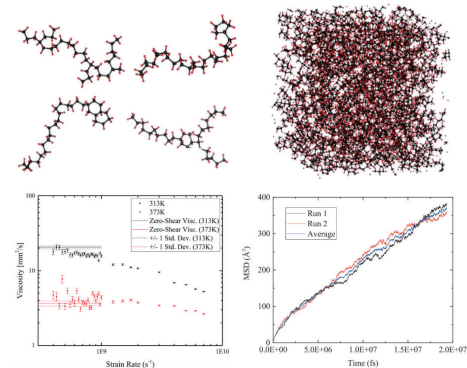
MedeA LAMMPS: 计算水团簇在UiO-66 Zr-MOFs结构

MedeA LAMMPS + Diffusion: 计算300K下，水在UiO-66中扩散系数，随着加载量增加，自扩散系数逐渐减小；在低、中、高负载中，水的行为有显著差异。

*参考文献: *AIChE Journal*. 2020; e17035.

MedeA在石化催化研究中的应用：光/电催化

◦ 重油体系黏度特性的分子动力学研究



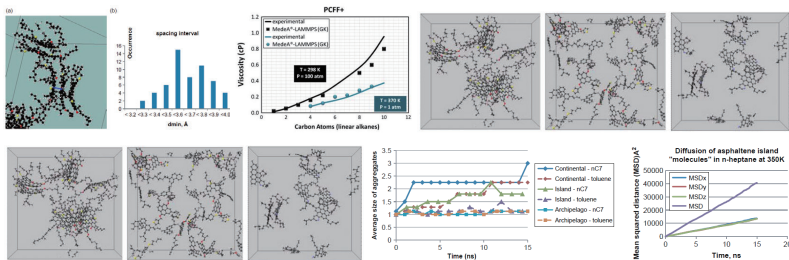
MedeA Amorphous Materials Builder: 将烷烃分子链按比例混合构建重油体系的无定形模型。

MedeA LAMMPS + MedeA Viscosity: 使用了非平衡模拟方法计算了体系粘度，得到了313K和373K温度下粘度随剪切速率的变化关系，结果表明温度升高会降低重油体系的粘度大小。

MedeA LAMMPS + MedeA Diffusion: 计算了氢气分子在重油体系和水中的扩散系数，发现氢气在水中的扩散系数比在重油中的扩散系数高两个数量级，与实验结果一致。

*参考文献：Manring C A and Hawaii A I, Annals of Nuclear Energy, 2019,128(JUN.): 140-147.

◦ 沥青质聚集行为(分子量及结构变化)敏感性的分子动力学研究



MedeA Polymer Builder: 创建沥青质分子与烷烃链分子结构。

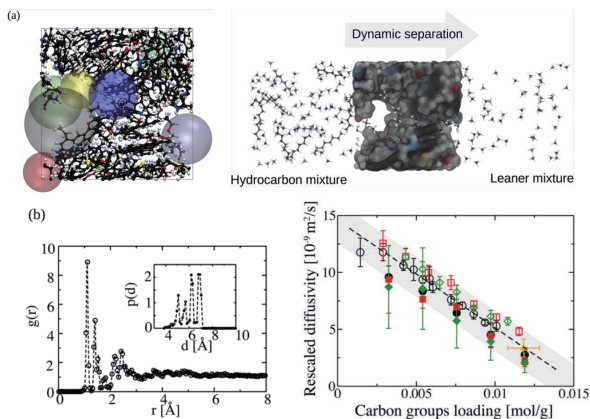
MedeA Amorphous Materials Builder: 创建沥青质混合物的无定形模型。

MedeA LAMMPS + MedeA Viscosity: 预测沥青质聚合物的粘度。结果表明烷烃的粘流活化能随碳原子数的变化关系与实验相符。250-400 K的温度范围内的剪切粘度随温度的变化关系与实验结果一致。

MedeA LAMMPS + MedeA Diffusion: 计算沥青质分子在正庚烷中的扩散系数，发现沥青质分子的运动遵循各向异性Fick扩散规律。

*参考文献：Philippe Ungerer, et al. Molecular Simulation. 2014, 40(1-3), 115-122.

页岩有机物中多组分烃运输的分子模拟研究



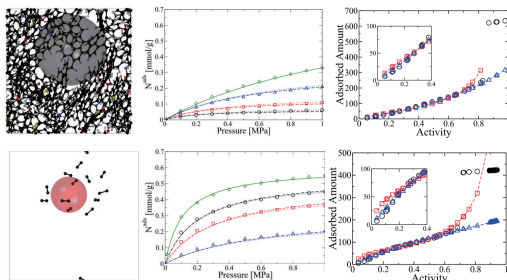
MedeA Amorphous Materials Builder: 创建多组分烃混合物的无定形模型。

MedeA LAMMPS + MedeA Analysis(Paircorrelation): 对体系进行NVT分子动力学模拟，并计算了C-C原子的对共轭关联函数，得到结构中碳原子的径向分布。

MedeA LAMMPS Diffusion: 利用均方位移计算了碳原子的自扩散系数，在整个加载范围内，观察到扩散系数的缩放趋势与纯化合物和混合物的模拟结果一致。

*参考文献: Julien Collell, et al. J. Phys. Chem. C 2015, 119, 22587-22595.

约束和储层压力对干酪根吸附气体的影响



MedeA Amorphous Materials Builder: 创建干酪根混合物的无定形模型。

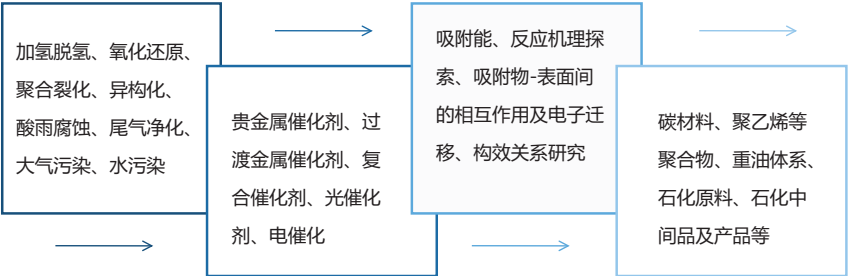
MedeA LAMMPS: 对体系做充分的NVT预平衡模拟，得到干酪根混合物的平衡结构。

MedeA GIBBS: 基于蒙特卡洛理论计算了的不同储层条件下(储层压力)干酪根对甲烷和乙烷等气体分子的吸附数，以预测气体混合物在非晶和固体微孔中的吸附效果，揭示了混合气体在微孔干酪根上竞争吸附的机理。

*参考文献: Collell J, et al. Energy & Fuels, 2015, 28(nov.-dec.):7457-7466.

MedeA的硬件需求

Component	Requirement
Operating system	Windows: 7/8/10; Linux: Centos, RedHat, Debian, Fedora, Suse, Ubuntu, Oracle, Mint
Architecture/Processor	Most 64bit architectures from Intel and AMD: Opteron, Ryzen, Zen, Core2, Core2Duo, i5, i7, i9, Xeon. ARM and Power8 are not supported.
CPU speed	Strong floating point performance required. No lower/upper hard limit on clock speed
GPU	NVidia Tesla GPUs with compute capabilities between 3.0 and 7.5 only (Tesla K, P, and V series, Quadro K, P, and GV series, GeForce GTX series, and Titan X and V series)
Memor	1-4 GB RAM per core; 4 GB/core is recommended for VASP
Hard Drive space	6 GB minimum for a full MedeA installation, no lower/upper hard limit for storing user generated data
Graphics	support of OpenGL 2.1 and higher and at least 128 MB of memory
Network	Fast Ethernet, 100 MB or faster
Display	Screen resolution of 1280x800 at minimum, recommended 1920x1080



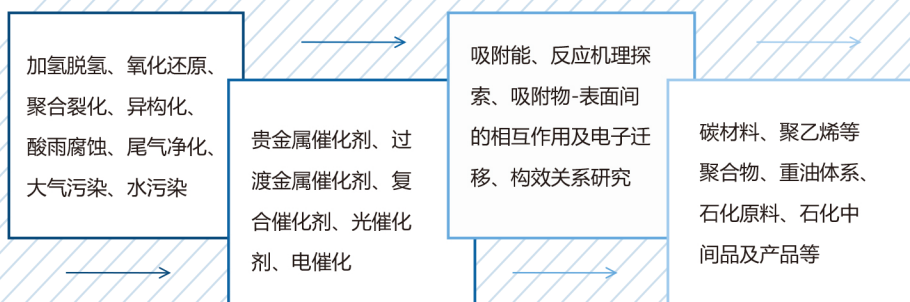


- 源资科技-VASP&MedeA在中国的官方代理商
- 中国地区只授权一家，可提供正规授权函
- 关注VASP & MedeA官方公众号
- 回复“试用”，填写表单，申请MedeA试用
- 联系邮箱support@tri-ibiotech.com



- 进入源资科技-B站视频空间，
- 观看所有教学视频！
- 方法1：登录哔哩哔哩网站或APP，搜索源资科技；
- 方法2：扫描左侧二维码直接观看。

石化催化研究设计解决方案



源资科技(上海)有限公司

电话: +86-21-32504385

网址: www.tri-ibiotech.com

邮箱: support@tri-ibiotech.com

上海总公司

地址: 上海市长宁区天山路18号701室

重庆办事处

地址: 重庆市渝中区石油路大坪时代天街

B馆3栋2803

北京分公司

地址: 北京市顺义区安泰大街融慧园15-3

南京维保中心

地址: 南京市玄武区珠江路699号

东鼎大厦C座401

