



MedeA[®]

全功能材料设计及性质预测平台

Materials Exploration Design and Analysis



MedeA[®]

MedeA[®] 全能材料设计与性质预测平台

- MedeA[®]为工程师和科学家提供材料领域的专业解决方案，应用领域涵盖了锂电、汽车、储能、半导体、电力、航天航空、石化、金属合金、高分子材料等多个应用领域。
- MedeA[®]能够帮助研究者解释实验中观察到的宏观现象，从微观的角度进一步理解材料的结构和性能，从而指导和设计实验，节省人力、物力和财力。
- MedeA[®]集数据库、建模、计算、性质预测和可视化结果分析为一体。涵盖量子化学、量子力学、半经验量化、分子动力学、蒙特卡洛、介观尺度、耗散粒子动力学等多个尺度的计算引擎，并能实现高通量计算及结果分析。

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研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较大的支持和较优质的服务，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。

MedeA[®]软件架构



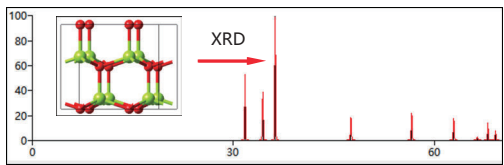
MedeA® InfoMaticA——数据库

上百万条数据，包含无机晶体、有机晶体、金属晶体、相图等

Pearson's Data File 无机晶体数据库，由美国材料信息学会发表，约有近303,000条数据，涵盖ICSD数据库中90%以上的数据。	COD晶体开放数据库 晶体开放数据库，包含390,000条无机、有机、金属有机等晶体数据。
MSI Phase Diagram数据库 MSI Eureka相图数据库，含晶体结构、相平衡、相图、材料性能、晶体形貌、热力学等性质。	NIST Crystal Data (NCD) 有机/无机晶体材料数据库，包括合金、金属间化合物、矿物等物质结构。

每条数据包含：

- Lattice parameters 晶格参数
- Structure Information 结构信息
- Literature Data 参考文献出处
- XRD Powder pattern X射线粉末衍射图
- Pair Correlation function 径向分布函数
-



多种组合检索条件：

- 可通过化学式、化学名称、化学配比检索
- 可通过结构完整度检索
- 可通过结构信息检索
-

Search Criteria	Detailed information	Coordinates	Geometry	Coordination	Pair Correlation	Powder pattern
Require that	Formula	contains any number of	atoms of	O		
Require that	Formula	contains any number of	atoms of	Si		
Require that	Formula	contains any number of	atoms of	Na		
Require that	Formula	contains any number of	atoms of	Ca		
Require that	--Add new criterion--					
						Run search Clear

MedeA® 运行环境

MedeA®强大的数据库能够帮助您搜索到您需要的材料结构，在Windows端的用户图形界面上创建各种模型，采用不同尺度的计算方法对材料进行模拟计算，紧接着通过相关性性质预测模块计算材料的热力学、动力学、光学、力学、声学、输运性质和反应过程.....在此过程中，我们建议您在高性能Linux工作站或者服务器上进行计算模拟及性质预测。



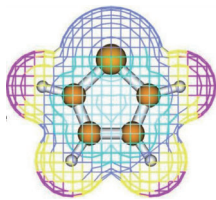
MedeA[®] 基本建模工具

Molecule Builder /New Molecule from SMILES /Polymer Builder

Molecule Builder提供了一个直观的用户图形界面，可以创建分子及团簇等非周期模型，实现3D周期模型和非周期模型结构的无缝转换。

MedeA还提供简化分子线性输入规范SMILES，只需通过ASCII字符串就能明确描述分子结构，比如多碳链分子。

Polymer Builder能够根据重复单元和聚合参数创建聚合物分子链模型。MedeA为您提供120多种重复单元。同时，通过修改参数可以定义端基或主链的扭转角度，创建出均聚物、共聚物及特殊聚合物。



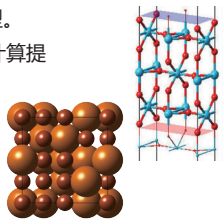
Crystal /Surface /Supercell Builder

Crystal Builder可以根据空间群、晶格参数、原子位置等信息来创建各种晶体模型。

Surface Builder可以创建符合化学计量配比的晶面，为之后的VASP和LAMMPS计算提供2D/3D周期性板层模型，并可交替改变表面终端，消除表面极性。

Supercell Builder可以模拟出扩展的表面和体相结构，具有三种构建方式：

- (1)直接沿三边扩展单胞的整数倍；
- (2)根据指定超胞晶格参数来扩展；
- (3)自定义三边扩展的矢量方向。



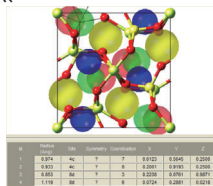
Find Empty Space /Substitutions Search /Random Substitutions

强大的间隙掺杂、定位取代掺杂以及随机取代掺杂建模工具。

Find Empty Space间隙掺杂工具可以搜索到结构中合理的空隙，并按照空隙的体积、配位、对称性等信息进行分类，从而方便将原子插入空隙中心，构造掺杂模型。

Substitutions Search定位取代掺杂/缺陷工具可以根据掺杂原子/空穴的个数和之间的距离，搜索所有掺杂/缺陷结构模型并给出原子个数和对称性等结构信息。

Random Substitutions随机取代工具可以随机选取晶体中任意个数的某种原子并将其替代成其他原子或空穴。通过该功能可以轻松构造出一定空穴浓度的固体材料或者不同比例的多元合金材料。



Nanoparticles /Nanotube /Nanowrap /Nanowire Builders

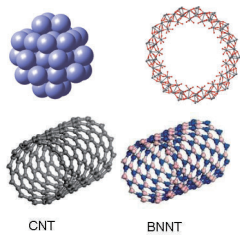
MedeA基本建模工具中包含了纳米团簇，纳米管等模型的创建功能，通过形状、键长、键角、悬挂键、对称性等建模参数的设置，可以轻松创建各种不同元素的团簇，包裹，管状，线状的周期/非周期结构。

Nanoparticles能够创建团簇及基础壳层结构。

Nanotube能够创建出各种纳米管结构，比如碳纳米管、硼氮纳米管。

Nanowrap能够创建出以两端表面为内，外表层的包裹结构。

Nanowire能够创建纳米线结构。



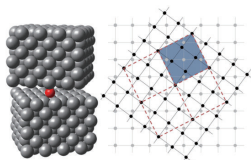
CNT

BNNT

MedeA® 专业建模工具

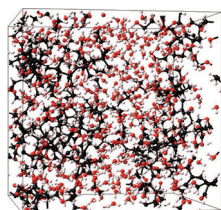
MedeA®Interfaces Builder——界面建模工具

MedeA Interfaces Builder能够在两种晶体表面之间自动搜索并构建界面层。构建的界面模型包含扭转晶界、共格晶界和半共格晶界等周期性模型，可直接用于第一性原理MedeA VASP或分子动力学MedeA LAMMPS计算。当然，您也可以在构建的界面模型中适当引入杂质，缺陷或间隙物种，创建较为特殊的界面材料。



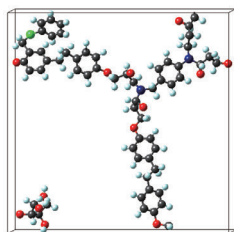
MedeA®Amorphous Materials Builder——无定型材料建模工具

MedeA Amorphous Materials Builder模块支持构建体相及层状结构，允许在既有的结构中加入无定型相以构建多层结构（液-液、液-固、固-固界面模型等），并能创建多种无定型凝聚态，包括本体聚合物、共混聚合物、聚合物溶液、电解质体系、小分子液体、液体混合物、混合氧化物、无机玻璃体与熔体、向列液晶体以及未固化的树脂/交联剂先驱体。



MedeA®Thermoset Builder——热固性材料建模工具

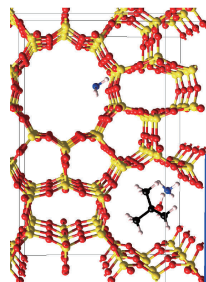
热固性材料的主成分为高度交联热固性聚合物，广泛应用于航空航天、汽车、电子光学设备的制造以及牙体修复、建筑设计材料等领域。MedeA Thermoset Builder工具在创建交联材料的过程中，将根据材料网状结构和凝胶点的演变、粘结应力、缺陷位点等参数对材料特性严格筛选，并根据实验中测定的交联密度创建出无应变分子模型。采用MedeA Thermoset Builder工具可以创建出多种热固性交联模型，包括环氧树脂、聚氨酯、双马来酰亚胺、聚酰亚胺、聚酯、热固性丙烯酸、尿素、苯酚、三聚氰胺、甲醛塑料等材料。



MedeA®Docking——孔结构分子对接工具

MedeA Docking利用著名的Metropolis蒙特卡洛算法，快速估计出主体与客体间的范德华作用，自动创建、修改和细化主-客体的结构，确定稳态能量，明确客体吸附物的位置与方向，从而评估并筛选出稳定的体系构象。

MedeA Docking还能够组合多种客体吸附物与主体结构，得到多分子在孔结构中的对接模型。MedeA Docking创建的模型能够直接应用于分子动力学MedeA LAMMPS和第一性原理MedeA VASP的计算。



MedeA[®] VASP 一量子力学计算模块

VASP是维也纳大学Hafner小组开发的第一性原理量子力学计算程序。VASP程序包能够基于密度泛函理论（DFT）、缀加平面波赝势（PAW）和平面波基组进行几何及电子结构优化计算。目前，VASP广泛应用于体相、表面、界面、团簇和分子等各种体系的研究，可以实现大规模的高效率并行计算。VASP采用了周期性边界条件（或超原胞模型）处理原子、分子、团簇、纳米线（或纳米管）、薄膜、晶体、准晶和无定性材料及表面体系。

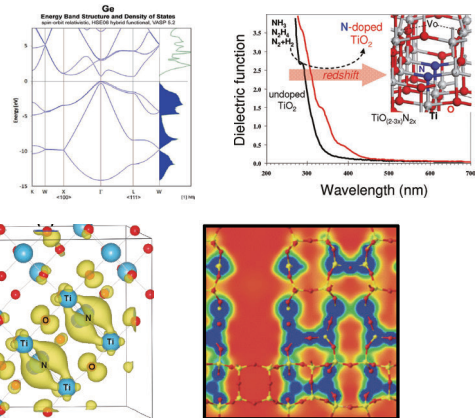
MedeA[®]VASP将VASP程序包完全整合到MedeA软件中，不仅简化了VASP的计算参数设置，而且可以直接进行各种结果分析，得到材料的多种理化性质。

MedeA[®]VASP可计算性质

几何性质	电子性质
结构参数（键长、键角、晶格参数、原子位置），稳定构型等	电子态密度，能带结构，电荷密度分布，电子局域化函数（ELF）等
光学性质	表面性质
介电函数，光导，吸收光谱，光谱发射率 预测材料颜色，反射率，折射率等	表面重构，缺陷等结构，表面能，表面吸附能，化学位移等
ACFDT/RPA	磁学性质
大体系精确能量计算，精确计算受力及G点处声子频率 自动优化原子位置，温度效应（适用于金属体系）	自旋极化，自旋轨道耦合，非共线性磁性，磁矩，磁化密度
Low Scaling GW	力学性质
准粒子光谱，温度效应（适用于金属体系）	弹性常数矩阵
计算材料激发态（GW/准粒子修正）	从头分子动力学模拟
实时机器学习力场（MLFF）	电声耦合

MedeA[®]VASP可视化结果分析

MedeA VASP能够便捷快速地处理分析计算数据，并给出可视化的结果分析，帮助您直接获得多种性质，如电子性质（能带结构、态密度、电荷密度等），磁学性质（磁化密度），光学性质（介电函数、吸收光谱等）。



MedeA[®] VASP—量子力学计算模块

MedeA[®] VASP算法特征

VASP通过近似求解Schrödinger方程获得体系的电子态和能量:

- 在密度泛函理论 (DFT) 框架内求解Kohn-Sham方程
- 在Hartree-Fock (HF) 的近似下求解Roothaan方程
- 支持DFT与Hartree-Fock混合的杂化泛函 (hybrid functional) 计算
- 支持格林函数方法 (GW准粒子近似、Low Scaling GW、ACFDT-RPA) 和微扰理论 (二阶Møller-Plesset)
- 支持On-site Coulomb校正模型, 采用DFT+U计算强关联体系

VASP支持的泛函:

- 局域密度近似 (LDA) 泛函与广义梯度近似 (GGA) 混合泛函, 包括 AM05、PBEsol、PBE、rPBE、BLYP
- 杂化泛函: HSE06、PBE0、B3LYP、DDH/DSH
- 范德华密度泛函: vdW-optB86b、vdW-optB88、vdW-optPBE、vdW-rpw86、vdW-revPBE、vdW-rev-DF2、SCAN+rW10
- Meta-GGA (revTPSS、TPSS、SCAN、M06-L、MS0、MS1、MS2、rSCAN、r2SCAN) 泛函, 引入动能密度, 提高能量和结构的计算精度
- 修正的Becke-Johnson meta-GGA泛函: MBJLDA用于计算电子性质和能隙。使用较少的计算量得到与杂化泛函和GW方法接近的计算精度

VASP支持实时机器学习力场 (MLFF)

- 使用机器学习加速从头算分子动力学模拟, 大幅缩短模拟时间
- 支持使用从头算分子动力学轨迹作为训练集, 创建机器学习力场
- 支持使用分子动力学模拟继续优化机器学习生成的力场 (可用于其他体系)

VASP可以自动确定任意构型的对称性:

- 根据对称性分析采用Monkhorst-Pack网格方法设置K点, 可用于高效计算固体材料和对称团簇
- Brillouin区的积分用Methfessel-Paxton、Fermi、Gaussian等方法针对不同材料 (金属、半导体、分子等) 进行电子积分, 并且提供Blöchl改进的四面体布点-积分实现更快的k点收敛, 进行更精确的能带结构和电子态密度计算

VASP使用高效的矩阵对角化技术求解电子基态:

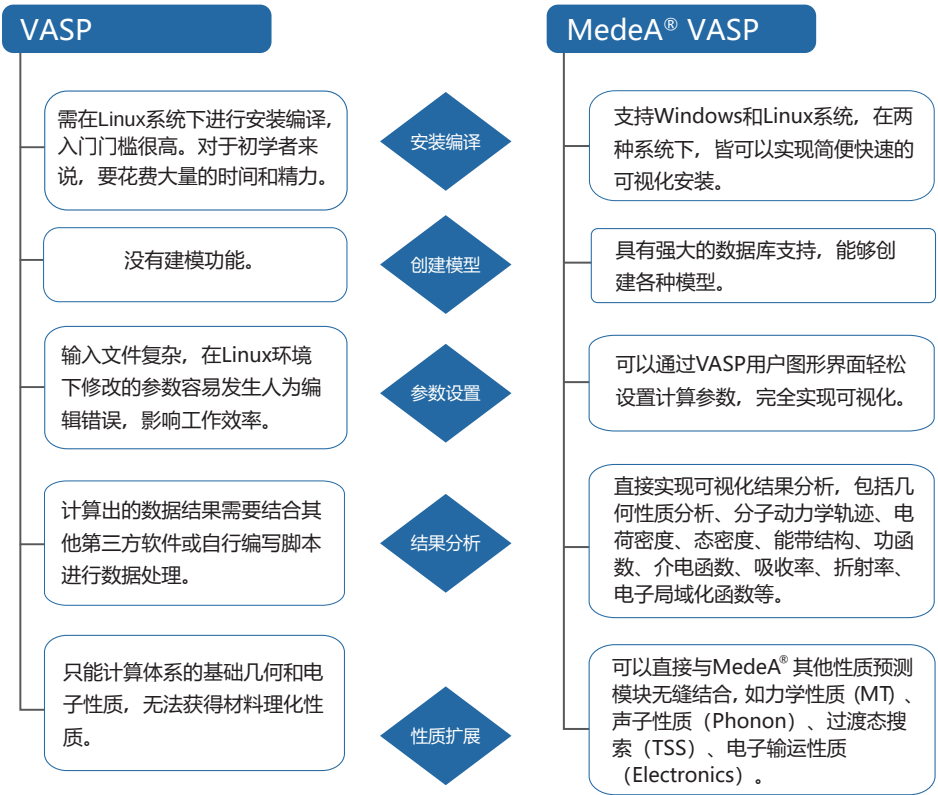
- 在迭代求解过程中采用了Broyden和Pulay密度混合方案加速自治循环的收敛

VASP基于赝势和平面波基组展开来计算电子结构

- VASP软件是基于赝势和平面波基组的第一性原理密度泛函计算程序。VASP使用的是平面波基组, 电子与原子核之间的相互作用使用投影缀加波赝势 (Projector Augmented Wave, PAW) 方法描述, 从而进行量子力学计算。VASP采用PAW赝势, 使得平面波基组尺寸非常小, 描述原子一般不超过100个平面波基组, 大多数情况下每原子50个平面波就能得到可靠结果。

MedeA[®] VASP—量子力学计算模块

MedeA[®] VASP与VASP对比分析



MedeA[®] VASP独有功能提升:

- 完全整合VASP6的最新版本, 支持VASP在CPU和GPU两种环境下的计算。
- 根据VASP面板计算参数的设置, 自动选取VASP不同版本的可执行程序 (std、gam、ncl), 有效提高VASP的计算效率。
- 支持VASPsol溶剂化效应、电声耦合、X-ray吸收光谱 (XAS) 计算、多种光学性质计算 (光导、反射、折射、吸收等)、材料颜色预测。
- 支持scaLAPACK大尺度快速计算、支持ACFDT-RPA精确计算能量和受力。
- 支持实时机器学习力场 (MLFF), 极大提高VASP第一原理分子动力学 (AIMD) 的计算速度。
- MedeA VASP集成了Intel编译器和mpi并行软件包, 无需您再对此进行安装配置。
- MedeA VASP提供专属杂化计算流程, 有效解决杂化泛函计算时间。
- MedeA VASP提供Automated Convergence功能, 自动测试不同体系的截断能和k点以获取合理参数值。

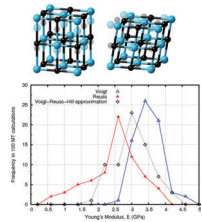
MedeA® VASP 性质预测模块

MedeA®VASP能够计算材料的几何和电子性质，同时，MedeA®平台提供了基于VASP的性质预测模块，与VASP计算模块无缝对接，丰富您对于材料的设计和研究！

MedeA®Mechanical and Thermal Properties (MT)

MedeA MT模块可以用于计算单晶、多晶体系的力学和热力学性质。

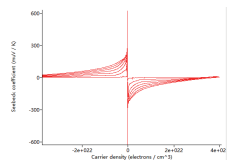
- 能够自动确定最少的弹性系数矩阵元个数。
- 能够计算力学性质，如弹性常数矩阵，Voigt、Reuss、Hill三种模型下的杨氏模量、剪切模量、体模量、硬度及泊松比等力学性质。
- 能够获得相关的热力学性质，如德拜温度、声速、0-3000K下的热容、零点能、振动熵、亥姆霍兹自由能等。
- 能够呈现以上热力学性质对温度的函数图。
- 能够基于VASP、LAMMPS、MOPAC计算各种体系的力学和热力学性质。



MedeA®Electronics

MedeA Electronics模块可计算固体的电子性质，包括费米能级附近较窄范围内的电子态，这些电子态控制了材料对外电场或温度（可以产生电流或热流）的响应。

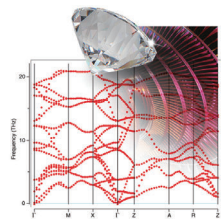
- 能够按照要求的k-points，预测选定能带的电子和空穴的有效质量。
- 能够预测出关键的电导性质，比如电导率、霍尔系数、电子比热容等。
- 能够预测出关键的热电性质，比如塞贝克系数、热导中的电子贡献。
- 能够呈现出以上电子输运性质对温度、化学势及载流子密度的曲线图。
- 能够呈现Fermi面的三维效果图以及掺杂效应对Fermi面的影响。



MedeA® Phonon

MedeA Phonon模块根据有限位移方法，计算原胞中的原子受力，构造力常数矩阵，计算分子、团簇、晶体、界面等体系中与温度相关的振动性质。

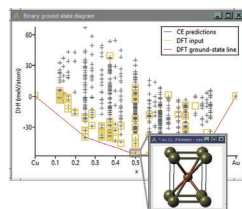
- 能够计算出声子色散谱、声子态密度。
- 能够计算出与温度相关的振动热容、熵、零点能、自由能等热力学性质（0-3000K温度范围内），并呈现出热力学性质对温度的函数图。
- 能够在布里渊区中心点对振动模式进行对称性分析，预测IR/Raman光谱。
- 能够采用流程图进行批量的Phonon计算。
- 能够基于VASP、LAMMPS及MOPAC对相应体系进行声子的计算。



MedeA® UNiversal CLuster Expansion (UNCLE)

MedeA UNCLE模块能够采用遗传算法或压缩传感方法高效处理上百个输入结构，延伸和扩展已有的集团，适用于体相空穴分布、多组分体系稳定相的结构及介观和微观尺度材料的稳定性等研究。

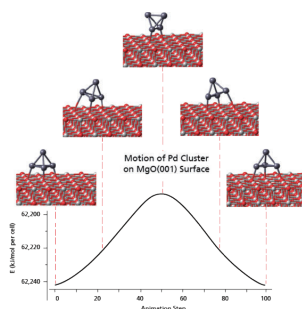
- 能够基于VASP模块采用通用集团展开式预测介观和微观尺度材料稳定性，对体系有序或无序现象做出精确预测，找到全局最优结构。
- 能够获得材料相稳定性与温度和浓度的函数关系，体系有序-无序的转变温度。
- 能够计算出溶解度、混合度、随机混合能及空穴浓度等参数。



MedeA® Transition State Search (TSS)

MedeA TSS模块能够确定化学反应或扩散过程中过渡态的结构和能垒大小，同时提供一套可自定义的过渡态搜索流程，提高过渡态搜索的成功率。

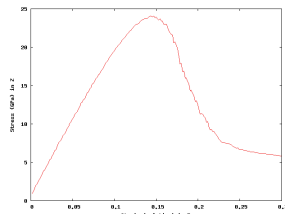
- 采用高效的Nudged Elastic Band (NEB)、Climbing Image (CI)、Dimer、DNEB方法进行过渡态搜索；采用BFGS2优化方法对所有image结构进行优化；采用RMM-DIIS minimizer方法对已确认过渡态结构进行优化，获得最终过渡态结构及能量。
- 提供细化过渡态的方法 (refinement)，在初步确定的过渡态image附近再次采用CI-NEB进行过渡态搜索，缩小搜索范围细化过渡态。
- 自主组合NEB、CI-NEB、DNEB、refinement、Dimer、RMM-DIIS minimizer多种优化方法，组建自定义过渡态搜索流程。
- 能够给出过渡态结构及反应或扩散能垒；自定义image绘出能量曲线图 (energy profile)；查看已绘制energy profile对应的动画轨迹。
- 结合Phonon模块可预测过渡态在Gamma点处是否存在虚频。



MedeA® Deformation

MedeA Deformation模块用于计算材料在弹性区域之外的塑性变形，计算材料屈服强度、断裂强度、剪切强度等力学性质。

- 能够自动确定最少的弹性系数矩阵元个数。
- 能够自动计算超出弹性范围的力学性质。
- 能够自动分析应力-应变曲线，计算材料杨氏模量、屈服强度、极限强度、断裂强度和剪切强度。
- 能够基于VASP或LAMMPS计算各种体系弹性之外的力学性质。



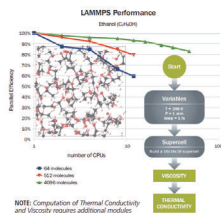
MedeA[®] LAMMPS—分子动力学计算模块

LAMMPS由Sandia国家实验室的Steve Plimpton团队开发，是基于力场的分子动力学模拟软件。LAMMPS能够模拟上百万原子的气、液、固等各种体系。

MedeA[®]LAMMPS (免费)

- MedeA免费为用户提供了LAMMPS模块接口，力场由MedeA Forcefield模块直接调用，力场参数自动分配到原子，通过流程图Flowchart界面完成后续的多步平衡模拟。

流程图包含多个组件，包括分子动力学模拟的基本操作组件，如体系初始化、能量最小化、初始化速度生成、NVT平衡模拟、NPT平衡模拟以及NVE平衡模拟等等，流程图可保存、修改和分享，以便和其他科研工作者分享计算过程和参数设置。



MedeA[®]Forcefield (免费)

力场是分子动力学模拟的关键，其选择影响结果的准确性。MedeA Forcefield 为您免费提供了大量的先进力场数据库，同时，力场文件可编辑，力场参数可添加或修改，外部力场文件可导入。

- 有机分子、聚合物力场**
AUA, compass, compass+, small_molecules+solids, oplaa, oplaa_extended, oplaa+, pcff, pcff+, trappe+, AUA+
- 无机化合物力场**
bks, comb3, cvff_aug, inorganic, clayff-dioctahedral, clayff-trioctahedral, clayff, Si-O_JCP2016-comb3, AlO_eam_coul, LiS_morse_coul, TaO_eam_coul
- ReaxFF : 化学反应力场**
AlLiSiO, AuOH, LiSCFO, LiSiCHOF, MoS, PdCHO, PtCH, PtNiCHO, protein_water, ZnOH, clay_zeolite_water, FeCrOS, LiC, LiMnO, TiOH, VCHO, FeOHCl, HONB, CHONSPiCINI, CHONSMoNi, CuClOH, CuOH, epoxy, BaZrYOH, CeO, CHO, CHON
- 半导体力场**
Stillinger-Weber, Tersoff, ZnCdTeSeHgS_Zhou_2013_Tersoff, SiO₂-Si_Munetoh_2007_Tersoff, REBO
- 适用于金属体系的嵌入原子势EAM (Embedded Atom Potentials)**
AlCo_Mishin_2013, AlCu_Cai_1996, AlMg_Adams_1997, AlNi_Mishin_2009, AlTi_Mishin_2003, Zhou_2004, FeNiCr_Bonny_2011, EAM_Adams, md-eam, Ni_EAM, Bonny's spline-based EAM

MedeA MLP (Machine Learning Potential) — 机器学习势函数库

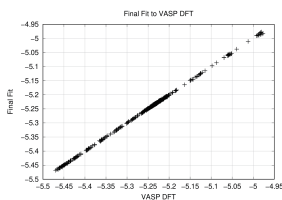
提供已发表的SNAP算法机器学习合金势函数，将量子力学的高精度扩展到了分子动力学尺度。

- 包含18个开箱即用的SNAP算法机器学习合金势函数（适用体系：Cu, Ge, Li, Mo, Ni, Si, Ta, W, InP, Li₃N, NbMoTaW, NiMo, WBe），能够处理复杂的成断键原子环境。
- 支持调用通过MLPG自行构建的机器学习势函数，支持与其他分子动力学模块结合使用。

MedeA MLPG (Machine Learning Potential Generator) — 机器学习势函数生成器

采用多种机器学习算法对VASP计算生成的大量包含结构与能量的数据集进行训练，拟合生成第一性原理高精度势函数（力场）。

- 能够自动根据VASP数据集生成机器学习描述符，根据训练集数据进行算法超参数优化，训练完成后可自动输出势函数文件与质量评估分析报表。
- 支持Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) 短程相互作用势，可模拟离子植入和辐照损伤。
- 支持先进的Spectral Neighbor Analysis Potential (SNAP)和神经网络势算法。



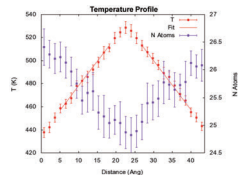
MedeA[®] LAMMPS 性质预测模块

为了满足不同的科研需求，MedeA[®]LAMMPS专门设计了多种性质预测模块，计算材料的力学、动力学以及热力学性质。

MedeA[®] Thermal Conductivity

预测体相和纳米结构体系的热导率，以及界面效应（Kapitza resistance）、杂质、同位素纯度对热导率的影响。

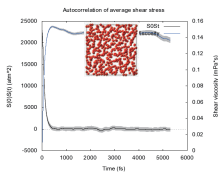
- 反向非平衡分子动力学方法（RNEMD）可用于所有体系的热导率计算。
- 平衡分子动力学（EMD）Green-Kubo方法，适用于均质体系及原子电荷较小的体系，适当大小的初始模型便可以得到准确的结果。



MedeA[®] Viscosity

预测纯液体以及液体混合物在不同温度和压力下的粘度。

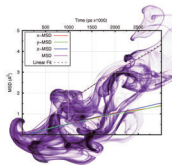
- 平衡分子动力学（EMD）采用Green-Kubo方法，适用于粘度中等的体系。
- 反向非平衡分子动力学方法（RNEMD），适用于粘度较大的体系。



MedeA[®] Diffusion

预测物种的扩散性质，给出体系中指定成分的扩散系数。

- 计算原子的均方位移(MSD)，拟合均方位移和时间的关系得到扩散系数。
- 通过log(MSD)-log(t)图显示并确认扩散动力学的存在，自动作图，可视化分析计算结果。



MedeA[®] Surface Tension

预测液体表面或界面处的表面张力。

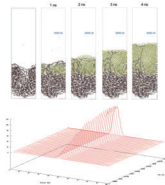
- 支持多层模型中表面张力的计算，研究界面附着特性。
- 可用于计算溶液以及熔体的表面张力。



MedeA[®] Deposition

模拟粒子在基体表面的沉积、生长、氧化及腐蚀等过程，分析粒子与基体表面的相互作用。

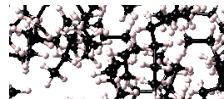
- 能够自定义沉积粒子的速度、能量、入射角度以及频率等因素。
- 给出沉积粒子分布图，分析渗透深度、反应范围、生成厚度等。



MedeA[®] Cohesive Energy Density

根据物质间的作用力参数，算出单位体积的内聚能，并且评估出分子间作用力的大小以及分子所含基团的极性大小，研究不同组分间的相容性。

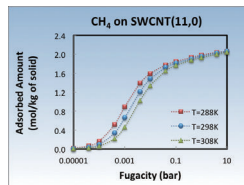
- 能够准确计算无定型凝聚相(如高分子)的内聚能密度。



MedeA® 其他计算引擎

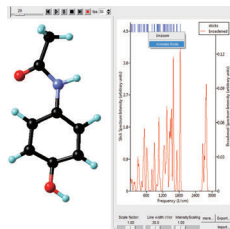
MedeA® GIBBS—蒙特卡洛计算模块

- 基于分子力学及蒙特卡洛算法 (Monte Carlo) 根据分子形状、柔性、极性计算热力学性质。
- 对于单相气体和液体分子体系，能够计算密度、摩尔体积、结合能、化学势、热膨胀系数、蒸汽压、汽化焓等相性质。
- 对于两相或多相气液混合相，能够计算相组成、相密度、结合能等。
- 对于孔结构吸附分子的体系，能够计算各物种的吸附量、主客体能量、积分吸附热等。



MedeA® MOPAC—半经验量子化计算模块

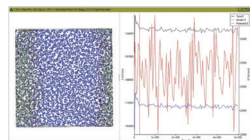
- 采用AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6和RM1哈密顿量算法获得分子轨道，生成热和分子结构。
- 采用限制性Hartree-Fock (RHF) 和非限制性Hartree-Fock (UHF) 波函数类型对非周期性体系（大体系）进行总能计算和结构优化。
- 运用EF, BFGS, LBFGS和NLLSQ四种方法进行能量最小化。
- 组态相互作用, 包含单重, 双重, 三重, 四重, 五重和六重基态和激发态。
- 波谱性质: 红外/拉曼 (IR/Raman) 以及紫外/可见 (UV/Vis) 。
- 热力学性质、力常数、偶极矩、极化率以及过渡态定位。



MedeA® Mesoscale—介观尺度计算模块

构建体系的beads模型, 在介观尺度上进行粗粒化分子动力学 (coarse-grained) 模拟或耗散分子动力学 (DPD) 模拟。

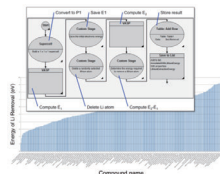
- 减小了粒子数，体系的势能面更加平滑。
- 空间和时间尺度的扩展加速了模拟进程，能够观察到全原子分子动力学模拟难以观察到的物理过程，如相分离。
- 提供粗粒化力场（如Martini, SPICA）用于介观尺度计算。



MedeA® HT Bundle—高通量计算模块

MedeA HT-Bundle共分为两个部分：MedeA HT-Launchpad和MedeA HT-Descriptors。此模块用于高通量计算、性质预测、材料筛选。

- MedeA HT-Launchpad能够有效地加速高通量计算，由InfoMaticA数据库和VASP轨迹创建结构列表，储存高通量计算的结构及结果，整理分类删除重复结构。
- MedeA HT-Descriptors拓展了MedeA HT-Launchpad的功能，用于计算由基础数据衍生得到的一系列物理性质，如沸点、熔点、临界温度/压力/体积、生成热、吉布斯自由能等。

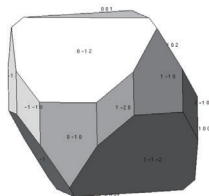


MedeA® 其他模块

MedeA[®] Morphology

MedeA Morphology模块可以用于预测晶体的形貌和形态。

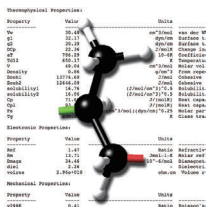
- 能够根据晶体结构、维度和对称性预测标准的BFDH (Bravais-Friedel-Donnary-Harker) 晶体形貌。
- 能够通过计算得到的晶体形貌进行交互式调整后，采用BFDH规则去索引或匹配实验现象。
- 能够以VASP或LAMMPS模块计算出来的表面能为输入数据来预测晶体形貌。
- 能够与Surface Builder (表面创建工具) 无缝结合，直接创建表面结构。
- 能够可视化查看晶体形貌，并能够对颜色、标签和透明度等方面进行调节。



MedeA® P3C

MedeA P3C模块能够根据重复单元对聚合物性质进行预测。

- 热力学性质：玻璃化温度、热膨胀系数、内聚能、比热容、密度、摩尔体积、溶度参数、表面张力、范德华体积。
- 电磁学性质：抗磁化率、介电函数、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。
- 输运性质：气体的渗透性、剪切粘度。

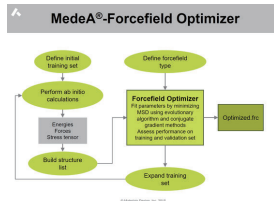


MedeA® Forcefield Optimizer (FFO)

Medea FFO是由Materials Design公司自行开发的力场优化工具。

Forcefield Optimizer基于从头分子动力学的数据, 预测力场, 以用于分子动力学或蒙特卡洛计算。

- 基于从头分子动力学计算的结构和轨迹（VASP）确定力场参数，包括能量、受力、应力等；基于遗传算法和最小二乘法来优化力场参数。
- 将采用优化好的力场计算出来的能量和力与之前VASP计算出来的结果进行对比分析，给出回归统计，拟合性质的图像化显示以及误差估计等。
- 最终优化好的力场以Medea中的力场格式（frc文件）输出，可直接用于之后的LAMMPS或GIBBS计算。



MedeA的硬件需求:

Component	Requirement
Architecture	Most 64bit architectures from Intel and AMD; client-server mode
Operating system	Windows: 7/8/10/11; Linux: Centos, RedHat Enterprise, Debian, Fedora, Suse, Ubuntu,
Queuing system integration	PBS/OpenPBS/Torque; LSF; GridEngine; SLURM
Parallel execution and GPU support	IntelMPI; OpnMP; NVIDIA GPU support for selected engines and applications
Memory	1-4 GB RAM per core; 4 GB/core is recommended for VASP



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



源资信息科技（上海）有限公司

上海市长宁区天山路18号701室

电话：+86-21-32504385

邮箱：support@tri-ibitech.com

网址：www.tri-ibitech.com

北京分公司：

北京市顺义区安泰大街

融慧园15-3