

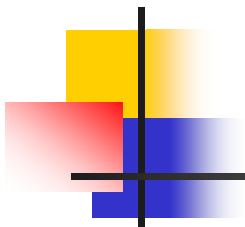


Materials Studio 简介



有关 MS

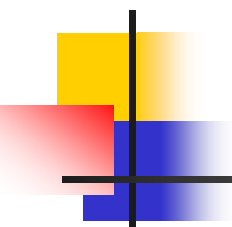
- Materials Studio是美国Accelrys公司推出的一款商业化的计算机模拟软件，该公司结合大量的生物，化学，药物，材料和化工数据库，推出了一系列计算机软件，其中与计算化学与材料相关的软件主要包括Cerius2和Insight II 以及MS，而前两种软件目前只能在IBM或SGI服务器上运行，只有MS允许在PC运行



MS支持Unix，Windows，Linux等多种操作系统。但是MS为模块结构的软件，目前有12个功能模块，不同的模块对操作系统的要求不尽相同，不过我们常用的Windows XP对所有功能模块均支持。

- MS到目前为止的最高版本为4.1版，从MS2.0版开始已经支持并行计算，计算能力强大

各模块对操作系统的要求



Module	Category	Windows 98	Windows Me	Windows NT	Windows 2000	Windows XP	Tru64 UNIX	IRIX	Red Hat Linux
Materials Visualizer	N/A	支持	支持	支持	支持	支持			
Amorphous Cell	B			支持	支持	支持	支持	支持	支持
CASTEP	B			支持	支持	支持	支持	支持	支持
COMPASS	B			支持	支持	支持	支持	支持	支持
Discover	B			支持	支持	支持	支持	支持	支持
DMol ³	B			支持	支持	支持	支持	支持	支持
DPD	B			支持	支持	支持	支持	支持	支持
Equilibria	B			支持	支持	支持	支持	支持	支持
Forcite	A	支持	支持	支持	支持	支持			



Clients

Windows 98

Windows Millennium (Me)

Windows NT Workstation 4.0 - SP6a

Windows 2000 Professional - Retail, SP1 - Retail, SP1 and SP2
and SP2

Windows XP Home Edition

Windows XP Professional



Servers

Windows NT Workstation 4.0 - SP6a

Windows NT Server 4.0 - SP6a

Windows 2000 Professional, Server, Advanced Server

Windows XP Home Edition

Windows XP Professional

Compaq ES/GS AlphaServers running Tru64 4.0F,
4.0G, 5.1 or 5.1A

SGI IRIX - 6.5.10 -6.5.16

Red Hat Linux - 7.2 and 7.3 (Intel compatible)

注意: Materials Studio 2.2 不再支持 Red Hat Linux 6.2 和 7.1, 只支持 Red Hat Linux 7.2



MS的功能模块

- 目前MS共推出了12个功能模块：

Materials Visualizer, Amorphous Cell, CASTEP, COMPASS, Dmol3, DPD, Equilibria, Forcite, Mesodyn, Reflex, Reflex Plus, VAMP

上述模块主要采用MM, MC, MD, 以及量子力学（DFT, ab-initial）等方法, 应用领域涵盖生命科学, 药物设计, 高分子聚合物, 材料科学, 固态化学, 表面化学, 光谱模拟, 生物化学, 生化分子结构分析等。

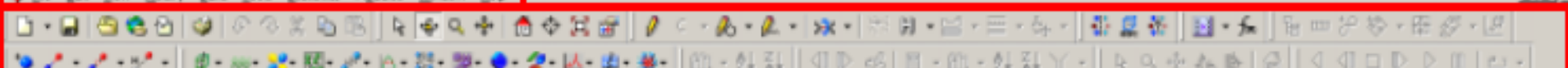


Materials Visualizer

- **Materials Visualizer**是**Materials Studio**的核心模块，它提供了快速直观的工具，使你能构造分子、晶体材料、表面、界面、层结构和高聚物的图形模型。你能操纵、查看并分析这些模型。**Materials Visualizer**也处理图表、表格和文本数据，提供软件基础和分析工具，以支持所有的**Materials Studio**产品。

CASTEP - MS Modeling - [Relaxing about AIAs\AIAs.rsd]

File Edit View Modify Build Tools Statistics Modules Window Help



Project



CASTEP
Relaxing about AIAs
AIAs CASTEP GeomOpt
AIAs.rsd
CO adsorbed on Pd(110)
TS about H2 adsorbed on Pd(110)
Elastic Constant of BN
Thermodynamics of Ge

Properties

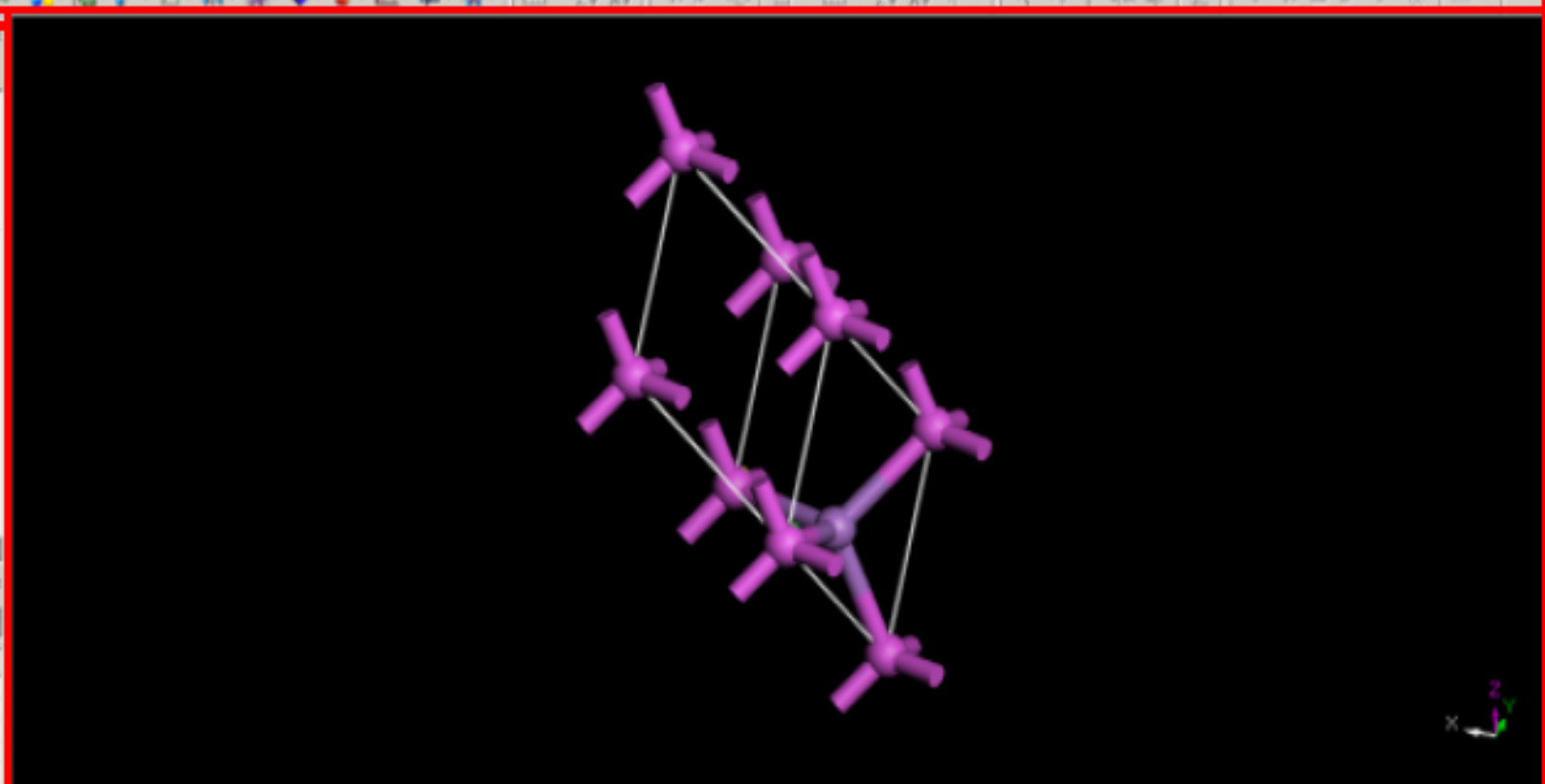
Filter All

Property Value

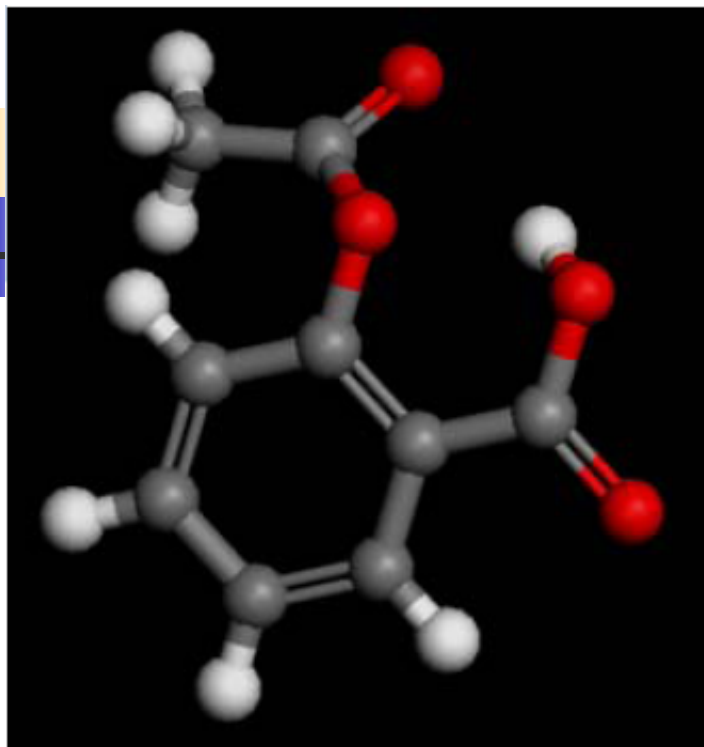
Visible

Name

Style

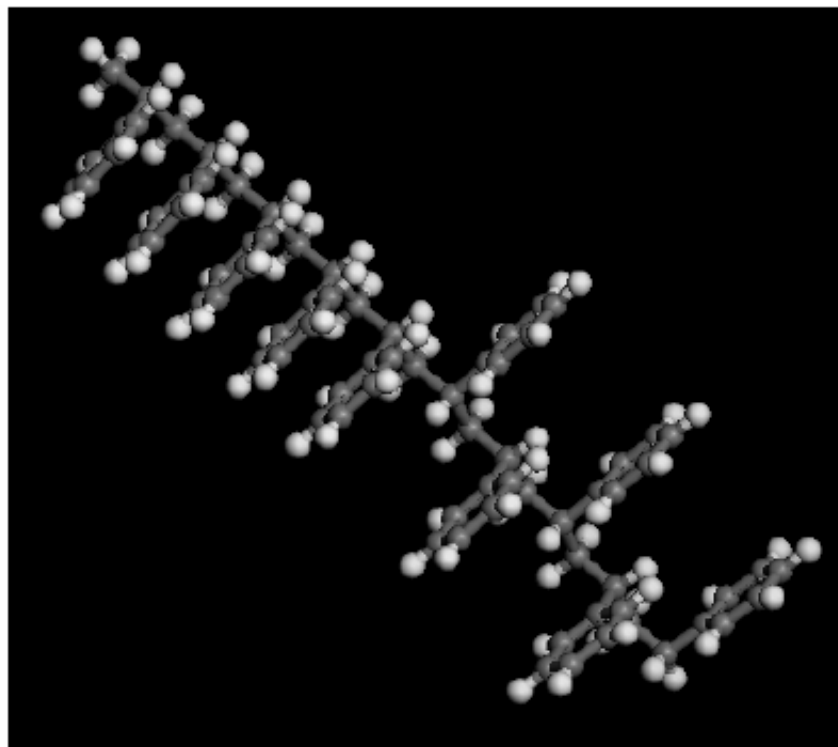


Description Job Id Gateway Server Status Progress Start Time Results Folder



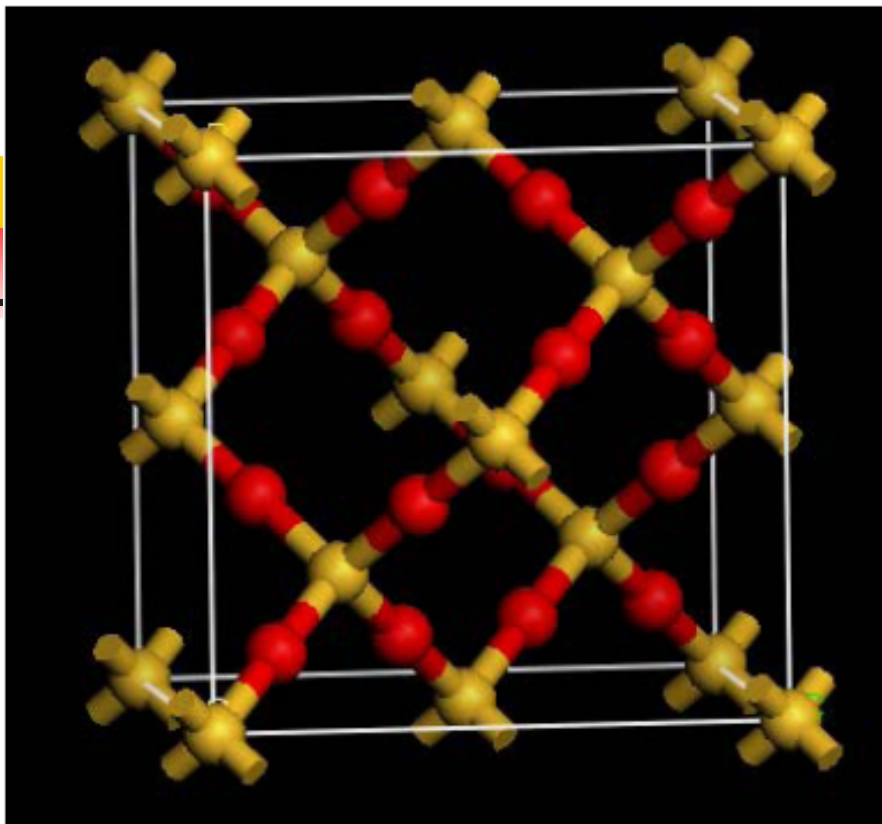
有机小分子

Sketching : 草画原子, 多元环, 键型, 加氢, clean



聚合物

Polymer builder : 提供丰富的单体数据库, 自定义单体, 构建均聚物, 共聚物 (无规, 交替, 嵌段), 树枝型聚合物



晶 体

Crystal builder : 晶胞参数, 原子座标, 空间群对称性

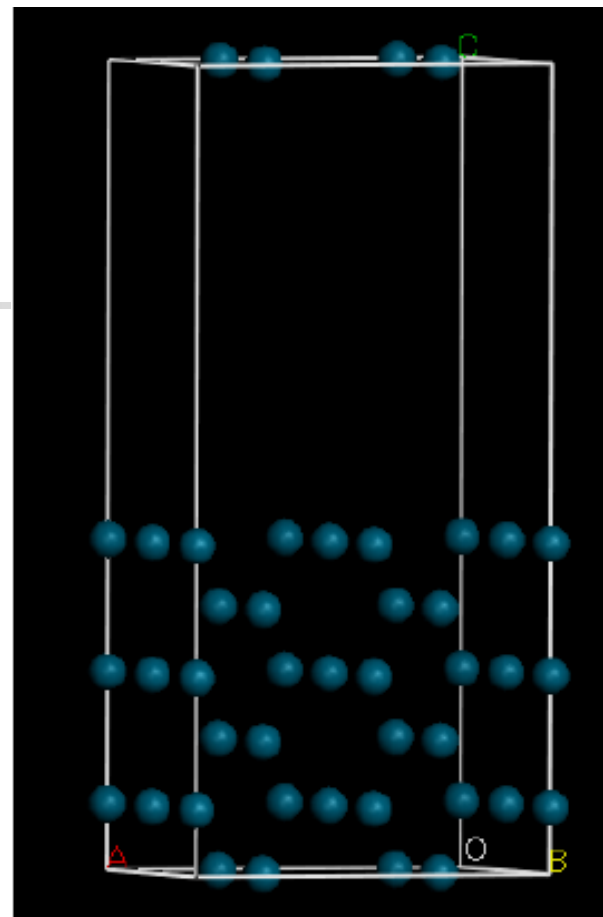
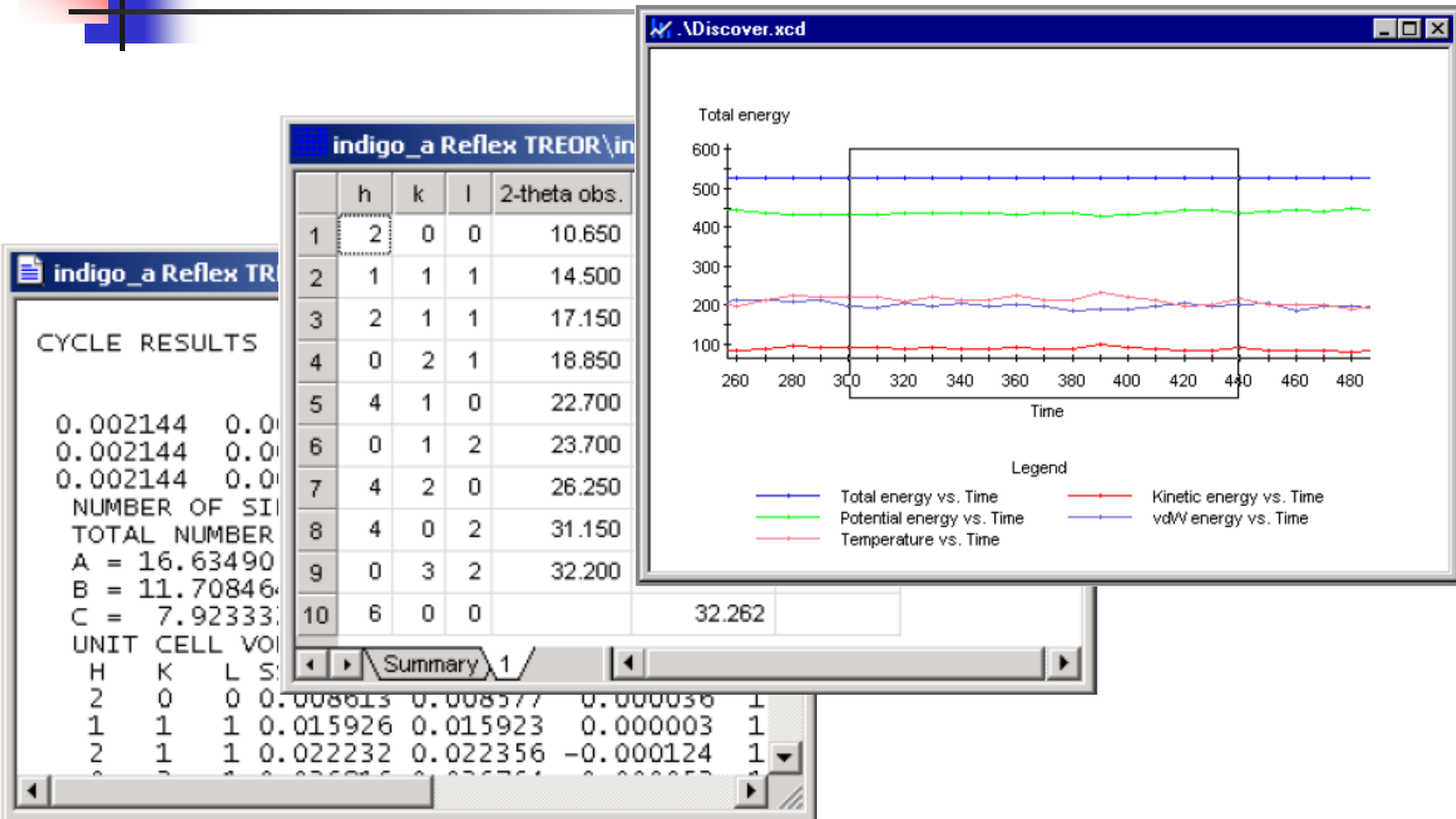


表 面

Cleave surface : 各个晶面, Vacuum, supercell, primitive cell

其他文档格式

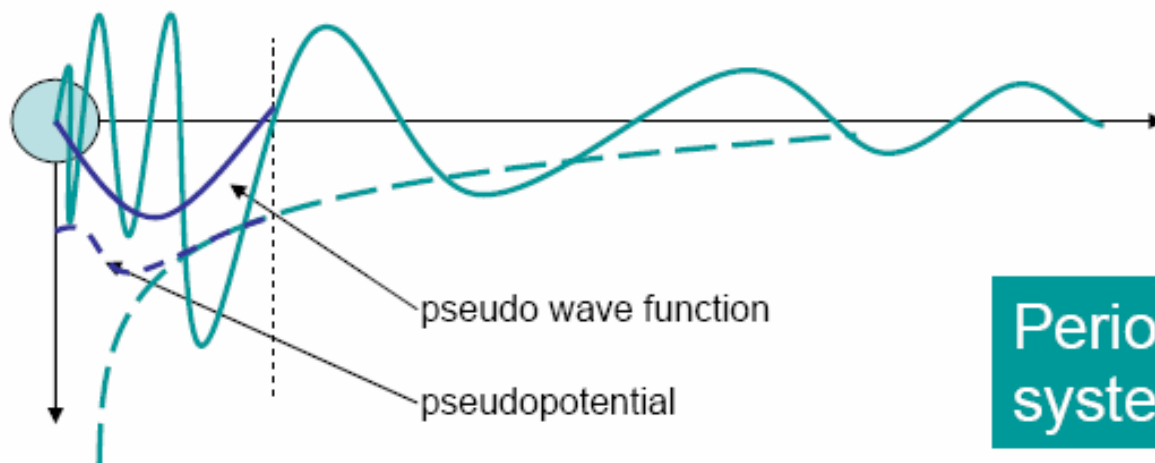


CASTEP模块

CASTEP使用赝势来重置真实原子势能



能够有效减少平面波的数量



- CASTEP基于总能量的平面波赝势理论，运用原子数目和种类来预测包括晶格参数、分子对称性、结构性质、能带结构、固态密度、电荷密度和波函数、光学性质。



CASTEP的新功能

- 经过筛选的相关函数 (**sX**)
 - 精确计算带隙
- 线形响应方法的强化（声子和电子场）
 - 在 Γ 点的LO/TO分裂
 - Born 有效电荷, 分子极化, 介电常数
- 采用利于内坐标进行结构优化
- **NPT/NPH** 系综分子动力学计算
- 对自旋体系进行处理
 - 铁磁性和反铁磁性体系
- **NMR**性质计算
- 性能优化 (速度和内存使用情况)



Dmol模块

- Dmol3 是独特的密度泛函理论量子力学软件，可以研究气相、溶液、表面和固体系统。由于它独特的静电学近似，Dmol3一直是最快的分子密度泛函计算方法之一，使用非局域化的分子内坐标，可以快速优化分子和固体系统的结构。使用LST/QST算法和共轭梯度结合，Dmol3可以有效地搜索过渡态，避免了耗时的黑塞矩阵的计算。过渡态搜索功能可以应用于分子和周期系统。



Dmol3 的新功能

- 特殊的原子基组cutoff
 - 计算性能方面的改进，特别对于周期体系，DMol3 比相似程序速度要快3-4倍.
- 精度控制方面的改进
 - 推荐的参数对于计算来说是可信赖的
- 性能的优化与Bug修正
 - 先进的TS Search技术
 - 全局泛函质量的改进，也就是说Fukui函数，以及对周期结构的计算
 - 已有功能的巩固
- 能带结构和态密度计算

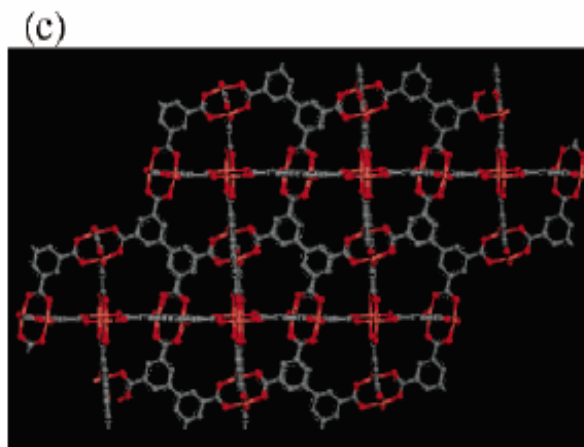
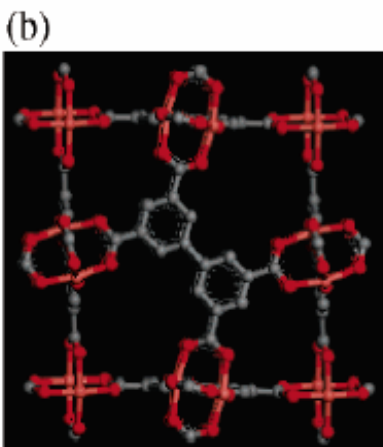
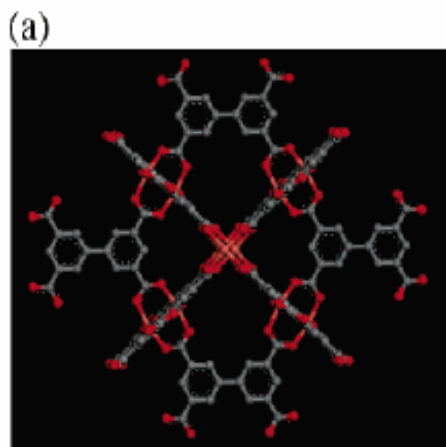


CASTEP与Dmol3比较

- CASTEP的DFT计算是以精确的量子力学ab-initial为基础的，结合分子动力学模拟及固态理论，结果通常比较准确，但是耗费机时较多。
- Dmol3的密度泛函是以数值型态表示原子基底函数，并能以变化内坐标的方式快速处理结构优化的计算，计算速度快，但精度一般不如CASTEP

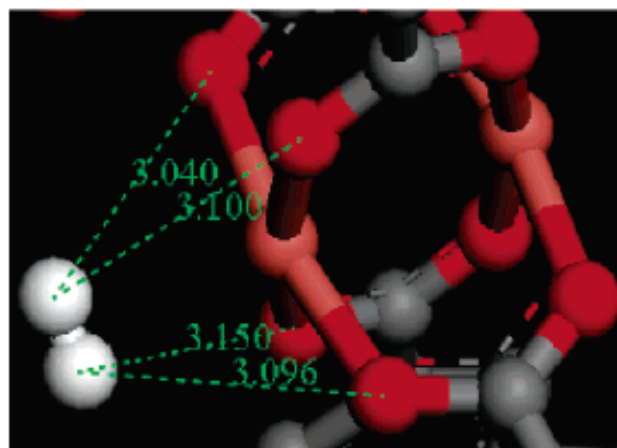
利用MS模拟的工作

- Understanding Hydrogen Adsorption in Metal-Organic Frameworks with Open Metal Sites: A Computational Study



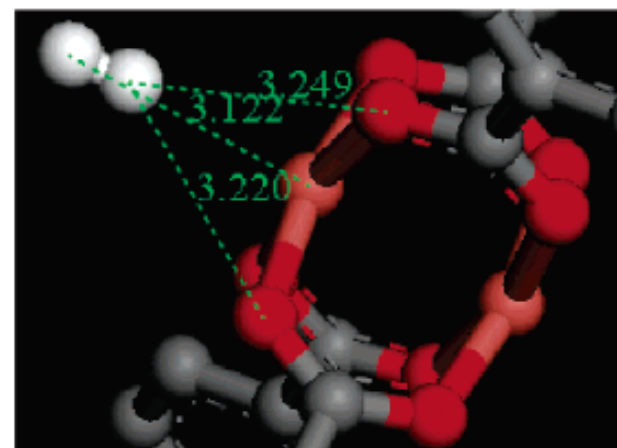
仲崇立等, *J. Phys. Chem. B*, 2005

(a)



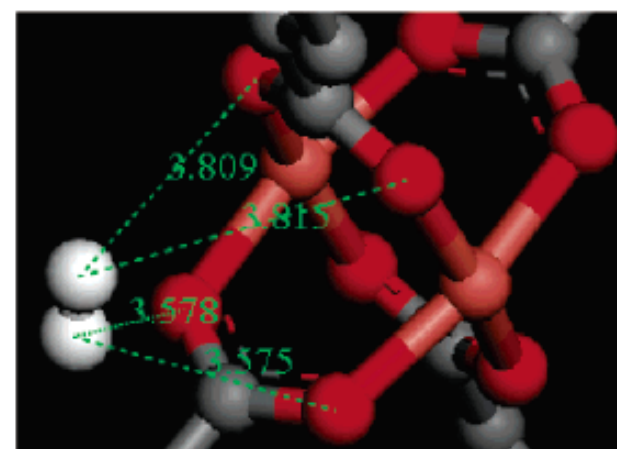
$$E = -13.44 \text{ kJ mol}^{-1}$$

(b)



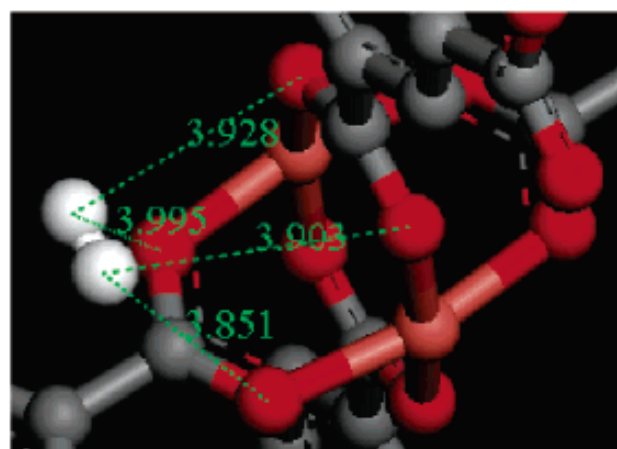
$$E = -9.71 \text{ kJ mol}^{-1}$$

(c)



$$E = -10.25 \text{ kJ mol}^{-1}$$

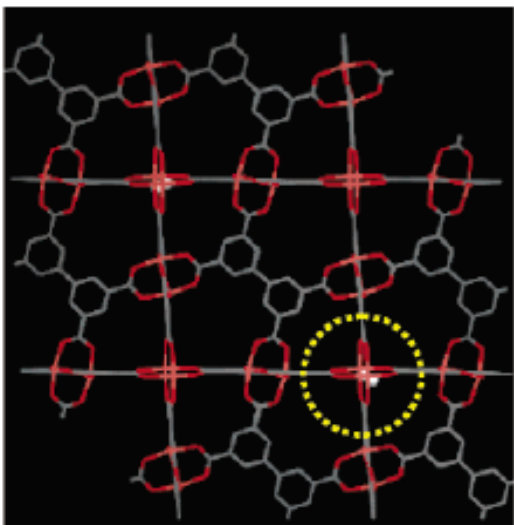
(d)



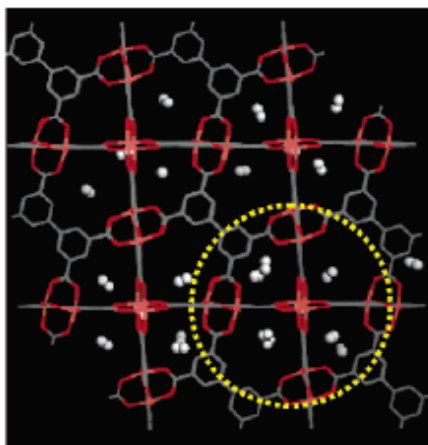
$$E = -8.85 \text{ kJ mol}^{-1}$$

不同压力下的吸附位置

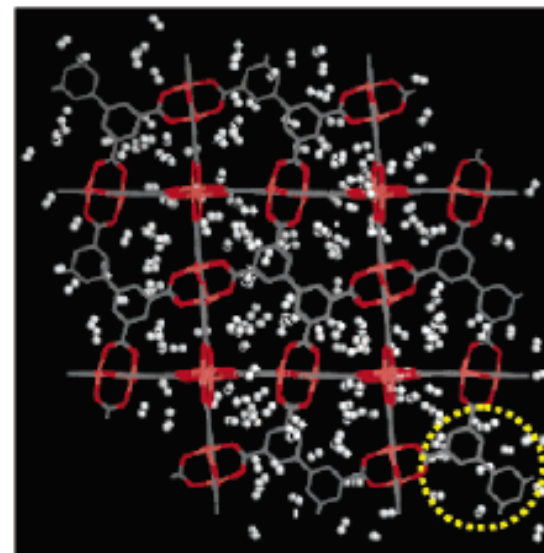
(a) $P=0.00013$ MPa



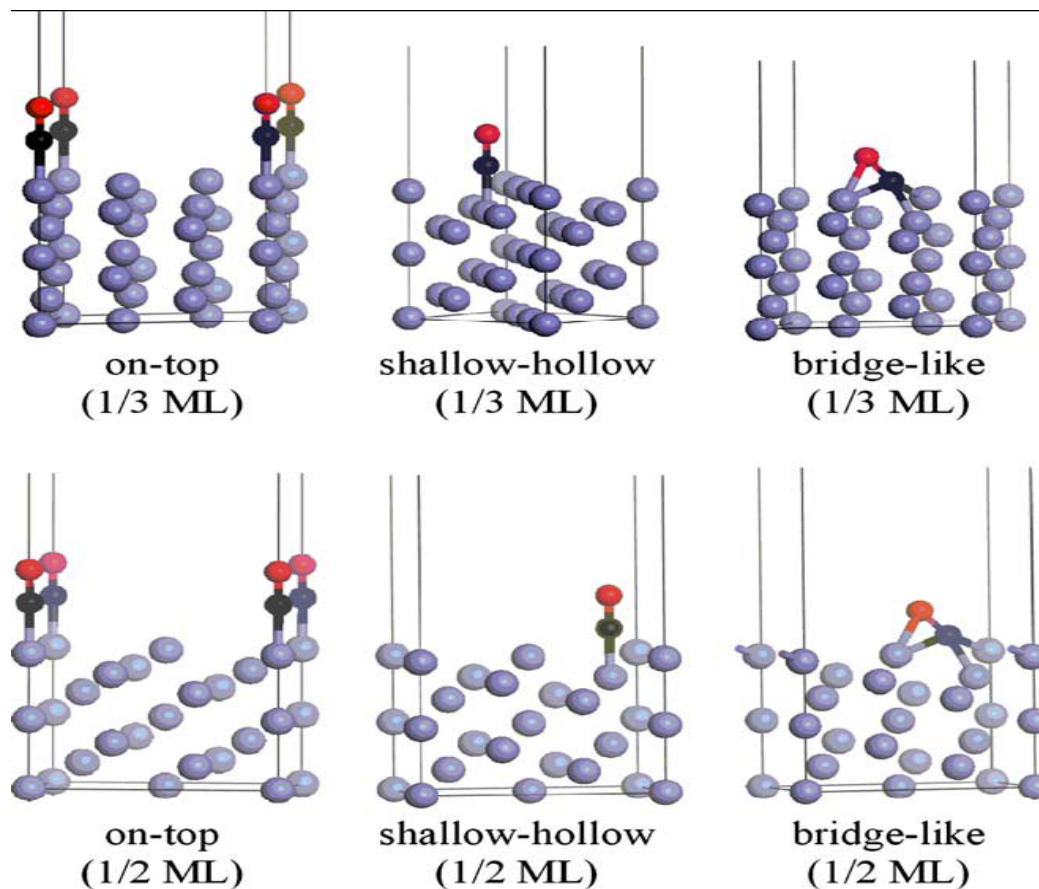
(b) $P=0.0043$ MPa



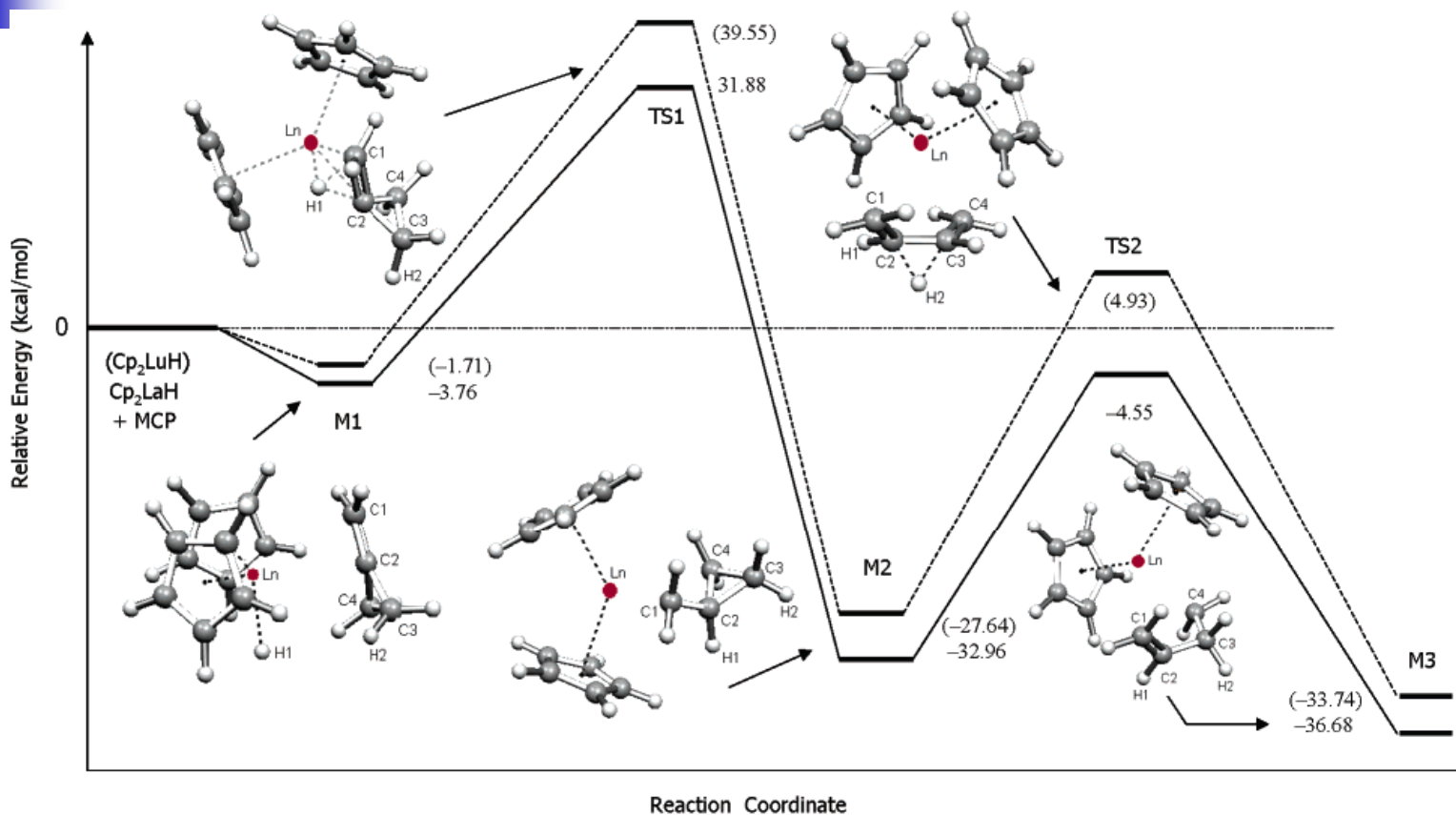
(c) $P=0.10$ MPa



Density functional theory study of CO adsorption on the Fe(111) surface



Density Functional Study of the Insertion and Ring-Opening Mechanism of MCP over Cp_2LaH and Cp_2LuH Catalysts



J. AM. CHEM. SOC. 2003, 125, 16210-16212



VAMP 模块

- VAMP是一个半经验量子力学程序，用于模拟气相和溶液中的反应和性质。
- 此程序已被优化得高度数值稳定和快速，即使对大分子系统的计算也十分有效。
- VAMP在几何、过渡态优化和静电学方面有很大改进。它可以模拟溶解作用，计算偶极矩、极化率、电荷密度、静电势、热力学性质和 ^{13}C 化学位移等性质。



DPD模块

- 耗散系统粒子动力学（DPD）是动态模拟包含完备流体动力学相互作用的流体粒子。
- 潜在的粒状粗糙性使得模拟跨越了传统分子模拟所达不到的长度和时间（在相同硬件上）。
- Materials Studio中的DPD包括输入参数的详细指令，保存了系统潜在的化学性质
- 采用周期性边界条件来有效模拟无限系统。封闭效应可以通过使用二维板观察出。Lees—Edwards边界条件可以用来模拟剪切系统。表面张力和临界胶束凝聚（critical micellar concentration）的性质也能获得，还有大量的可视化和数字输出。



Mesodyn模块

- MesoDyn是研究大系统介观尺度的动态方法。这种算法动态地跟踪由化学势梯度和Langevin噪音造成地组元密度场变化。系统不同组元间通过计算的能量或者Flory—Huggins参数的有效势来相互作用。它是牺牲原子水平上的细节换取大系统和长时间的。
- MesoDyn可以容易地研究微相分离（microphase separation）、胶束偏聚（micellar aggregation）和自组装等现象。确定几何形状地剪切和限制效应也可以研究。
- MesoDyn的应用包括：油漆和乳液、化妆品和其它个人用品、金属高聚物混合材料、表面活性剂的溶解、复杂药物缓释物质和很多其它方面。



Discover模块

- Discover是Materials Studio的“模拟引擎”。
- 它集成了很大范围已被证明适用于分子设计的分子力学和动力学方法。
- 它使用精心设计的经验力场作为基础，可以有把握的计算最小能量构象、分子系统一系列构象和动态轨道。
- Discover为Amorphous Cell等模块提供了计算基础。
- 周期性边界条件可以用来模拟固态材料，无论是晶态还是无定型态或者是溶液。



COMPASS 模块

- COMPASS是支持凝聚态材料原子级模拟的功能强大的力场。COMPASS代表Condensed-phase Optimized Molecular Potentials for Atomistic Simulation Studies。
- COMPASS是第一个参数化和被凝聚态性质验证了的从头计算力场，并加入了多种孤立系统模拟用的从头计算和经验的数据。因此，这种力场能精确地同时预测在很大温度和压强范围内，很多种孤立系和凝聚态分子的结构、构象、振动和热力学性质。
- COMPASS 最近的改进在参数化了45种无机氧化物材料和包含有机无机材料混合系统界面。



Forcite模块

- Forcite是分子力学模块，可以使用经典力学对任意分子和周期系统进行势能和几何优化计算。Forcite支持COMPASS、UFF和Dreiding力场。藉由力场的广泛性，Forcite原则上能处理任何材料。几何优化算法提供了最速下降法、共轭梯度法、准牛顿法和完全Newton-Rhapson法，可以准确地进行能量最小化计算。



Amorphous Cell模块

- Amorphous Cell是建立复杂无定形系统代表性模型并预测主要性质的一套计算工具。能预测并研究的性质包括内聚能密度、状态方程行为、链堆砌和局部链运动。
- Amorphous Cell特点有建立包含小分子和高聚物任意比例混合的系统、产生有序向列相中间相和无定型材料厚板的专门功能，这适合于创建界面模型，用于研究粘着和润滑。



Equilibria模块

- 用于确定有机分子和高聚物相图的强大模块，它基于吉布斯系综的MC模拟法为基础。
- 可以计算纯组元在给定温度下汽-液共存点、二元和三元系在任意给定温度和压强下汽-液或液-液共存点。临界常数工具可以根据补充的一系列纯组元的共存点预测临界点。使用这个强大的工具，依据Ising scaling law，从相图上已知的几个共存点就可以获得纯组元系统完整的相图。它也有计算任意给定温度下小分子的第二维里系数的功能。



Reflex 模块

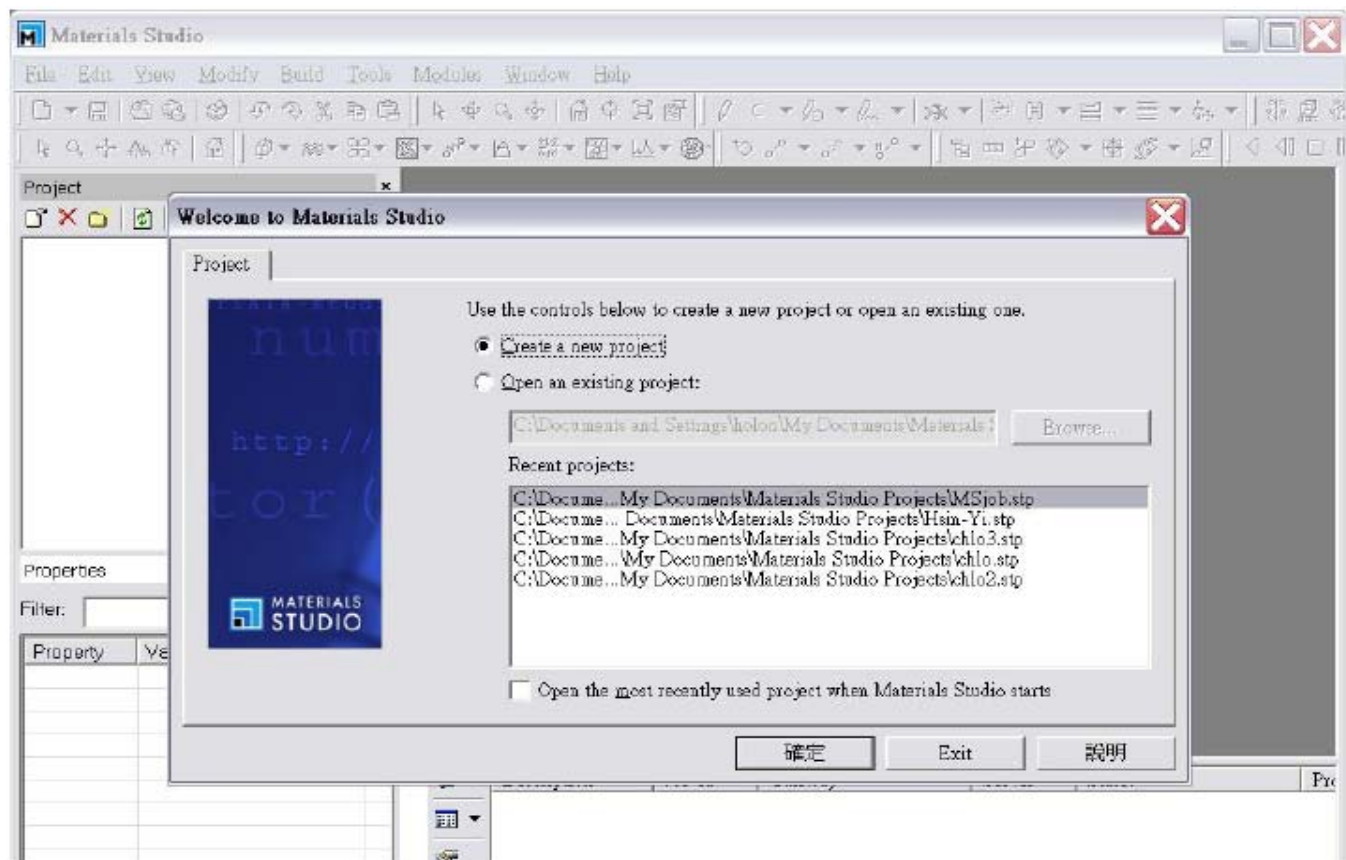
- Reflex提供快速交互的粉末衍射数据模拟。使用Power Diffraction工具，模拟结构以图形显示，便于理解。模拟结构可以直接和试验数据比较。模拟结果可以在结构改变后立即更新，以便和试验结构实时比较。可以进行X射线、中子和电子衍射模拟。

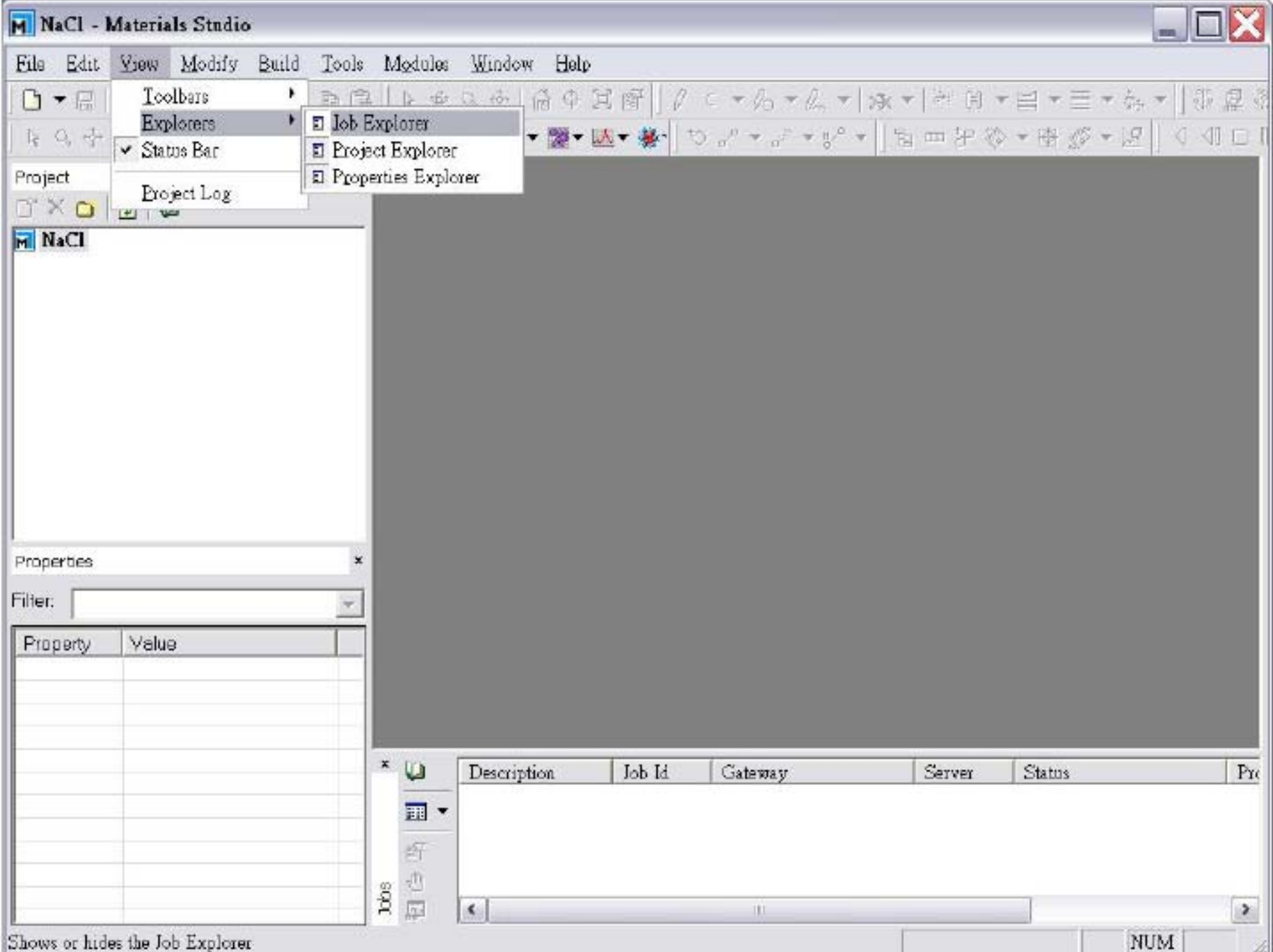


Reflex Plus 模块

- Reflex Plus 是 Reflex 的高级版本，在标准 Reflex 功能上加入了有效的粉末衍射结构分析技术。它提供了从高质量粉末衍射数据中确定晶体结构的完整功能。

模型的建立





Toolbars

Explorers

- Job Explorer
- Project Explorer
- Properties Explorer

Status Bar

Project Log

NaCl

Properties

Filter:

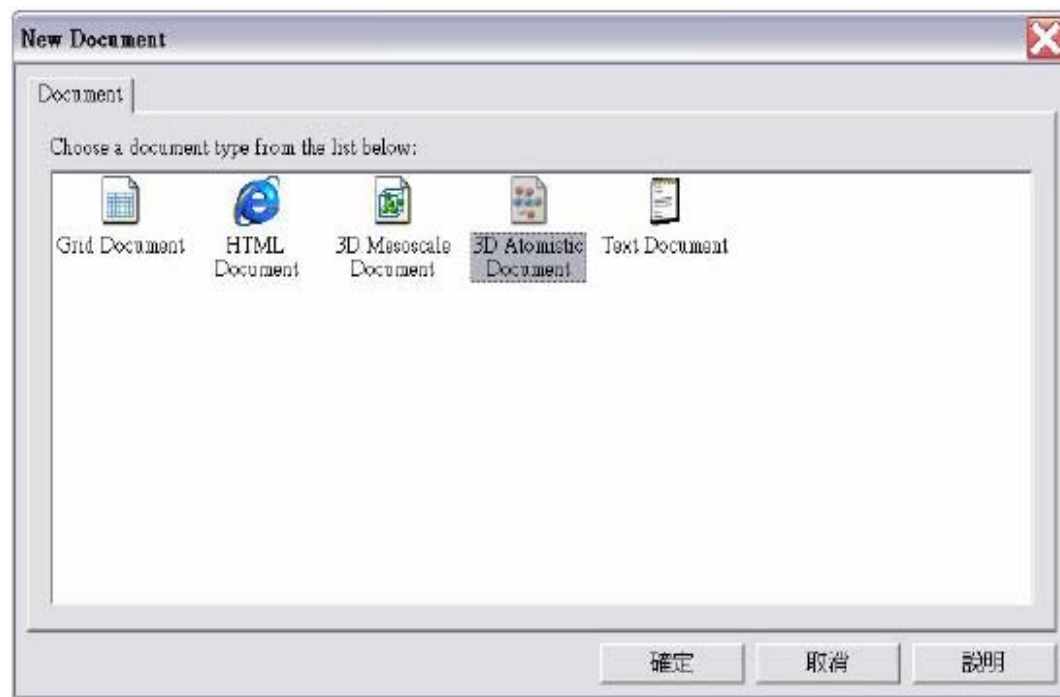
Property	Value

Jobs

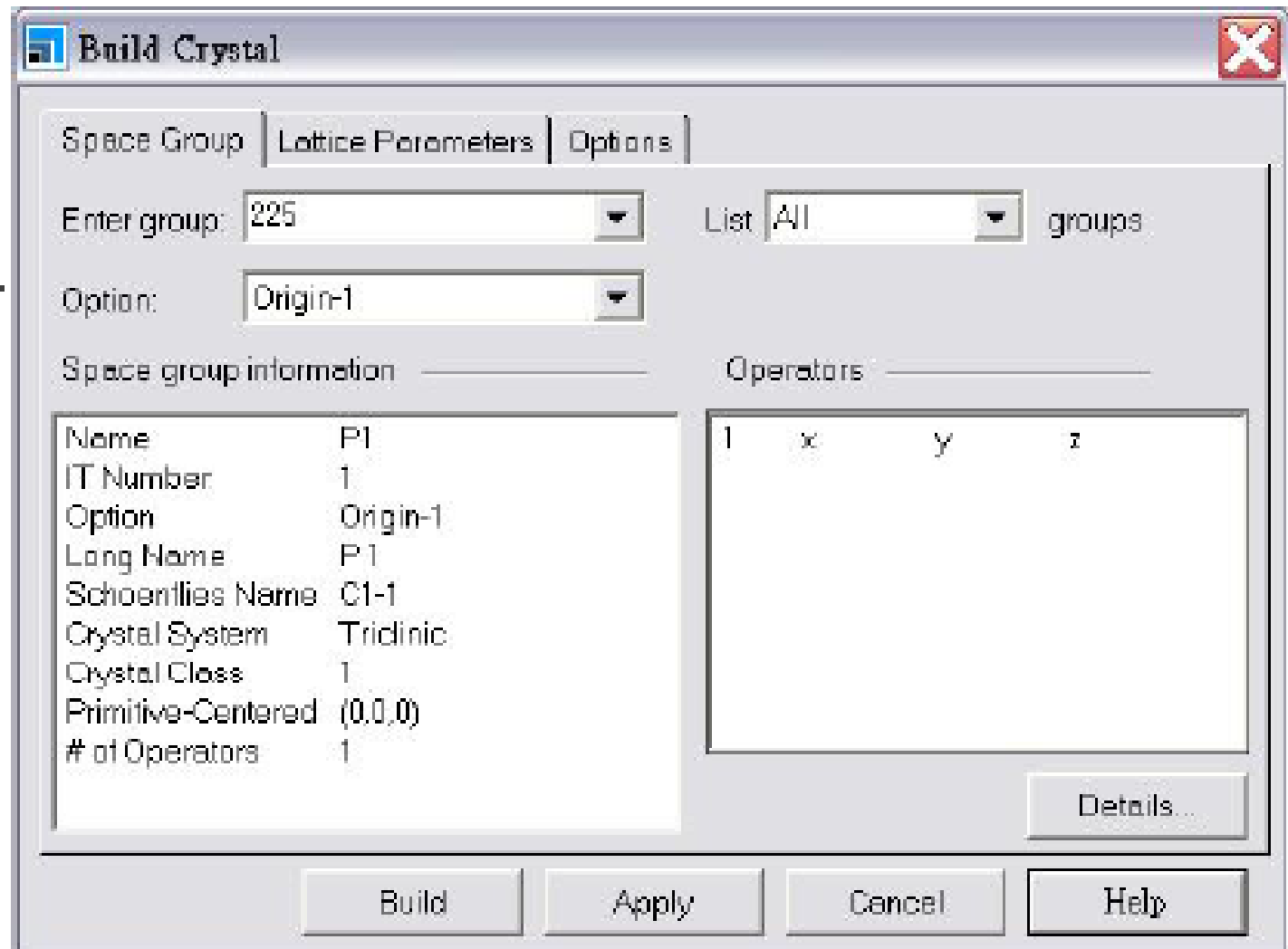
Description	Job Id	Gateway	Server	Status	Pro

手工绘制分子模型


--绘制NaCl晶体模型



1、建立一个3D文档



build → crystal → Space group(ICSD : 225)



Build Crystal

Space Group | **Lattice Parameters** | Options

Lattice type: 3D Cubic

Lengths (Å)

a: 5.64 b: 5.640 c: 5.640

Constraints: $a = b = c$

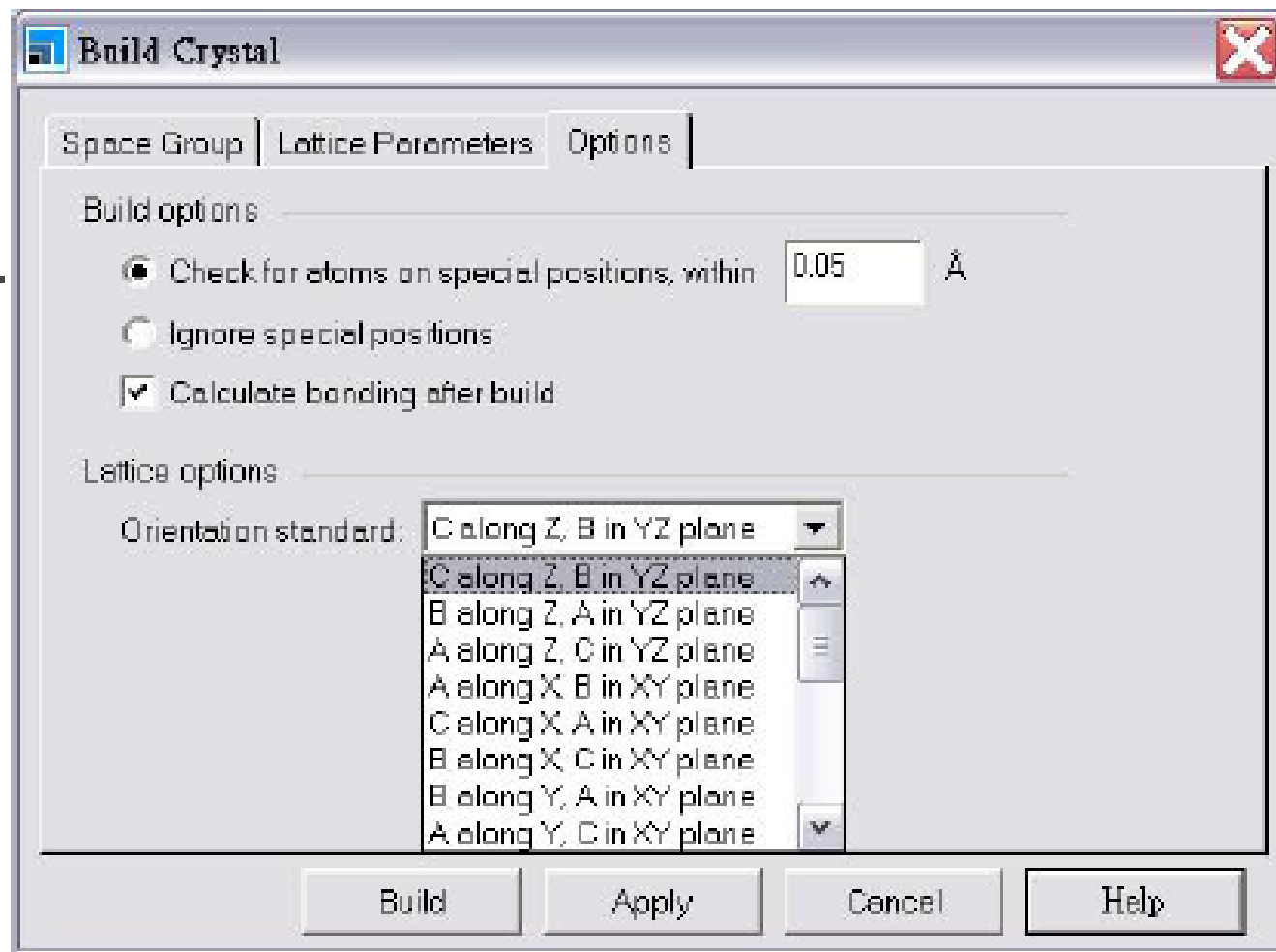
Angles (degrees)

α : 90.000 β : 90.000 γ : 90.000

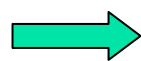
Constraints: $\alpha = \beta = \gamma = 90$

Build Apply Cancel Help

在 Lattice Parameters 设定晶胞参数



在 **Options** 选择坐标取向，
一般用默认设置即可



在已建立的空间群里添加原子

Add Atoms

Atoms | Options

Element: Na

Name:

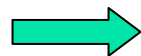
Oxidation State: 0

Occupancy: 1.0

Temperature Factors: ☒ None ☐ Isotropic ☐ Anisotropic

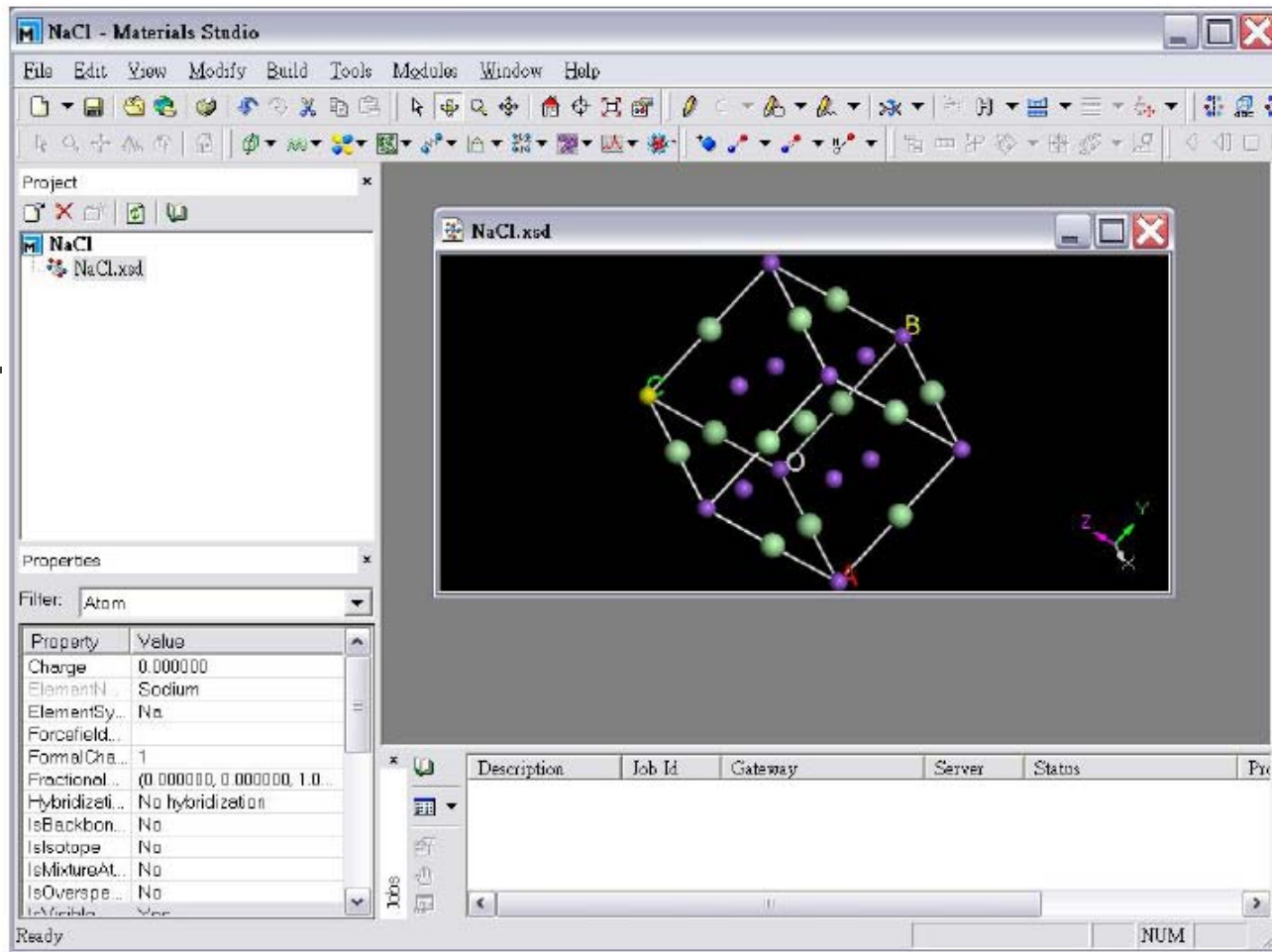
a: 0.000 b: 0.000 c: 0.000

Add Help

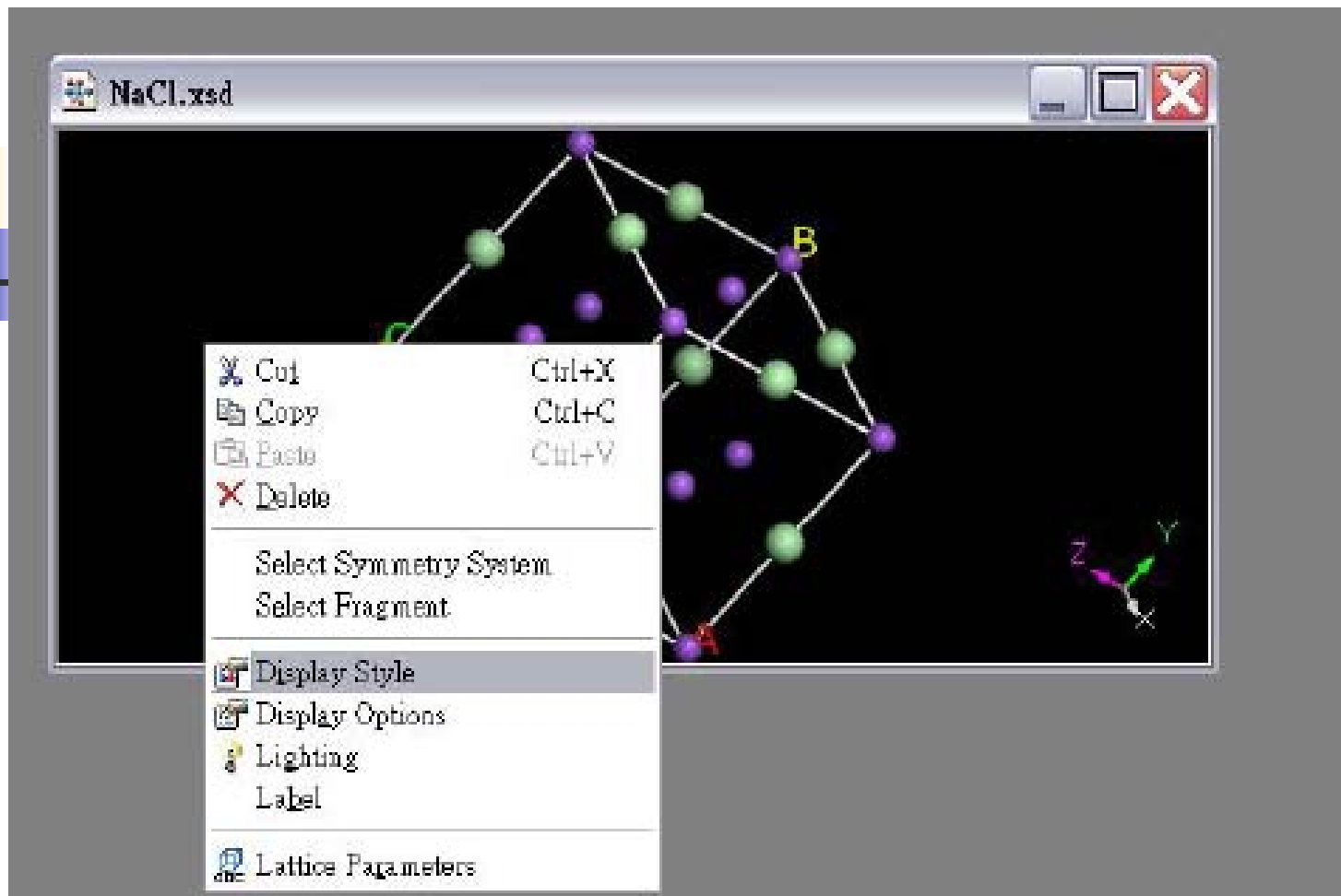


- 1、选择元素种类;
- 2、输入原子座标

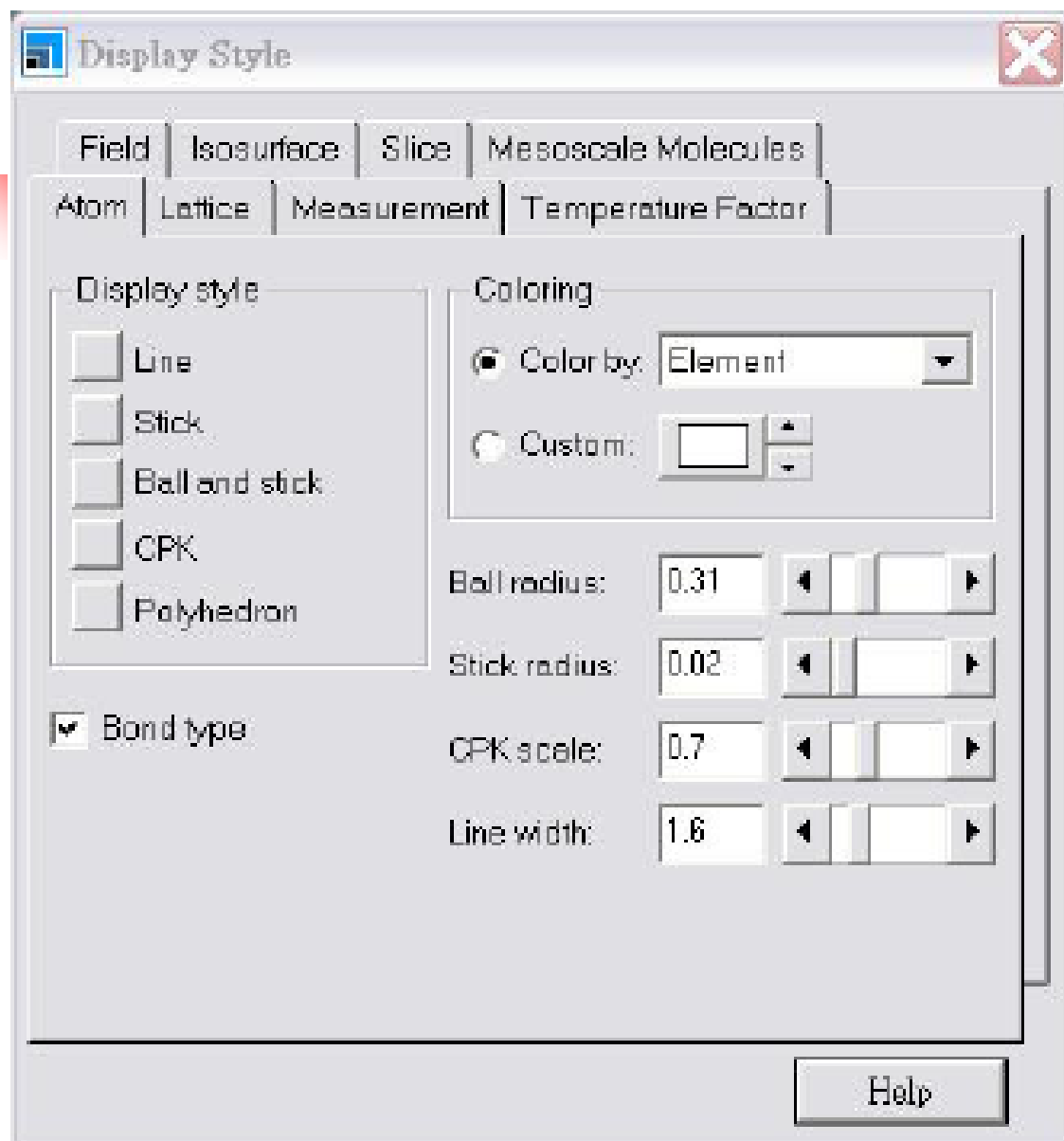
(注: 使用相对座标, 其具体数值可在ICSD上查到)



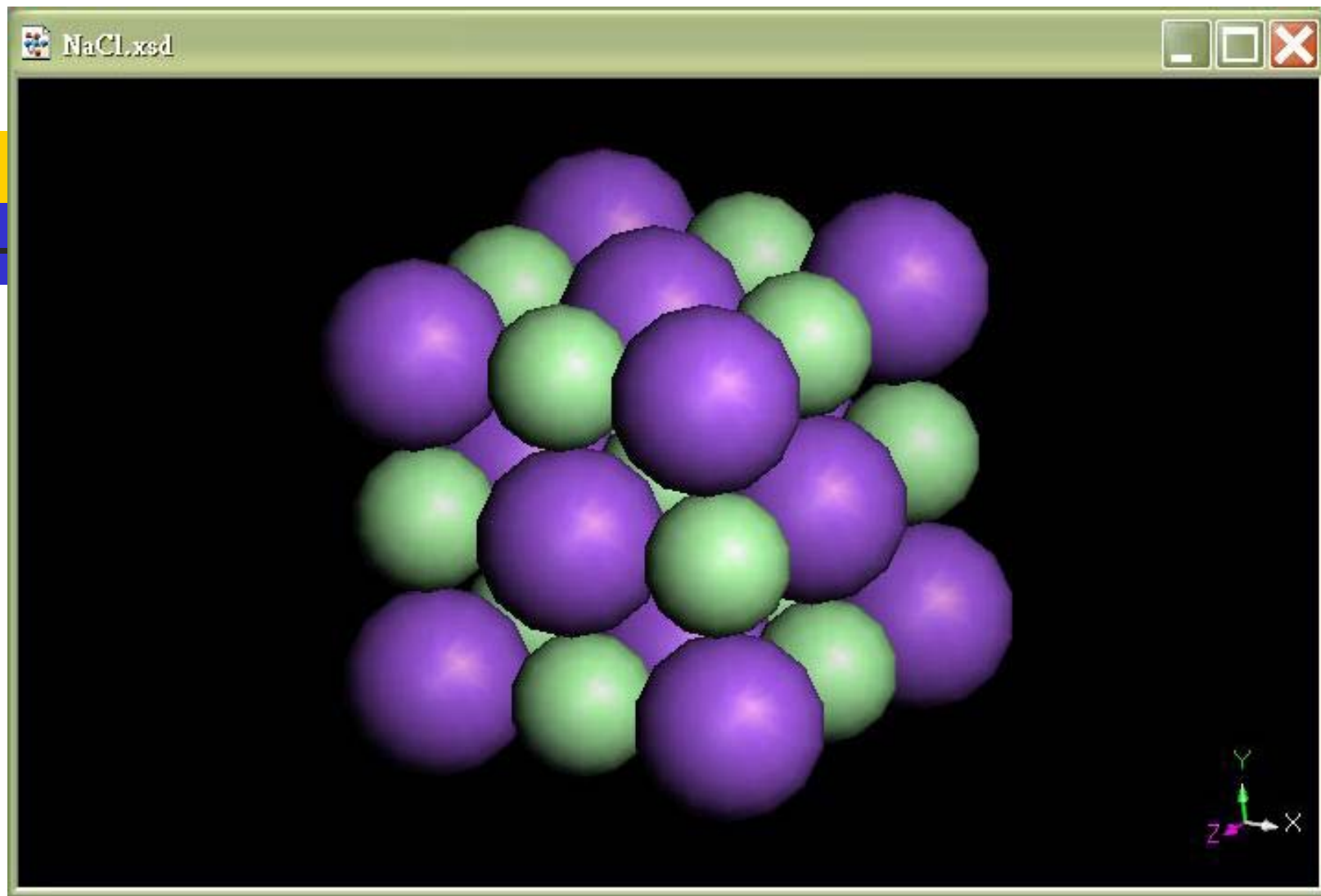
- 模型建立后，可从Property explorer查看所建模型是否与目标模型一致。
- Property explorer——filter——symmetry system



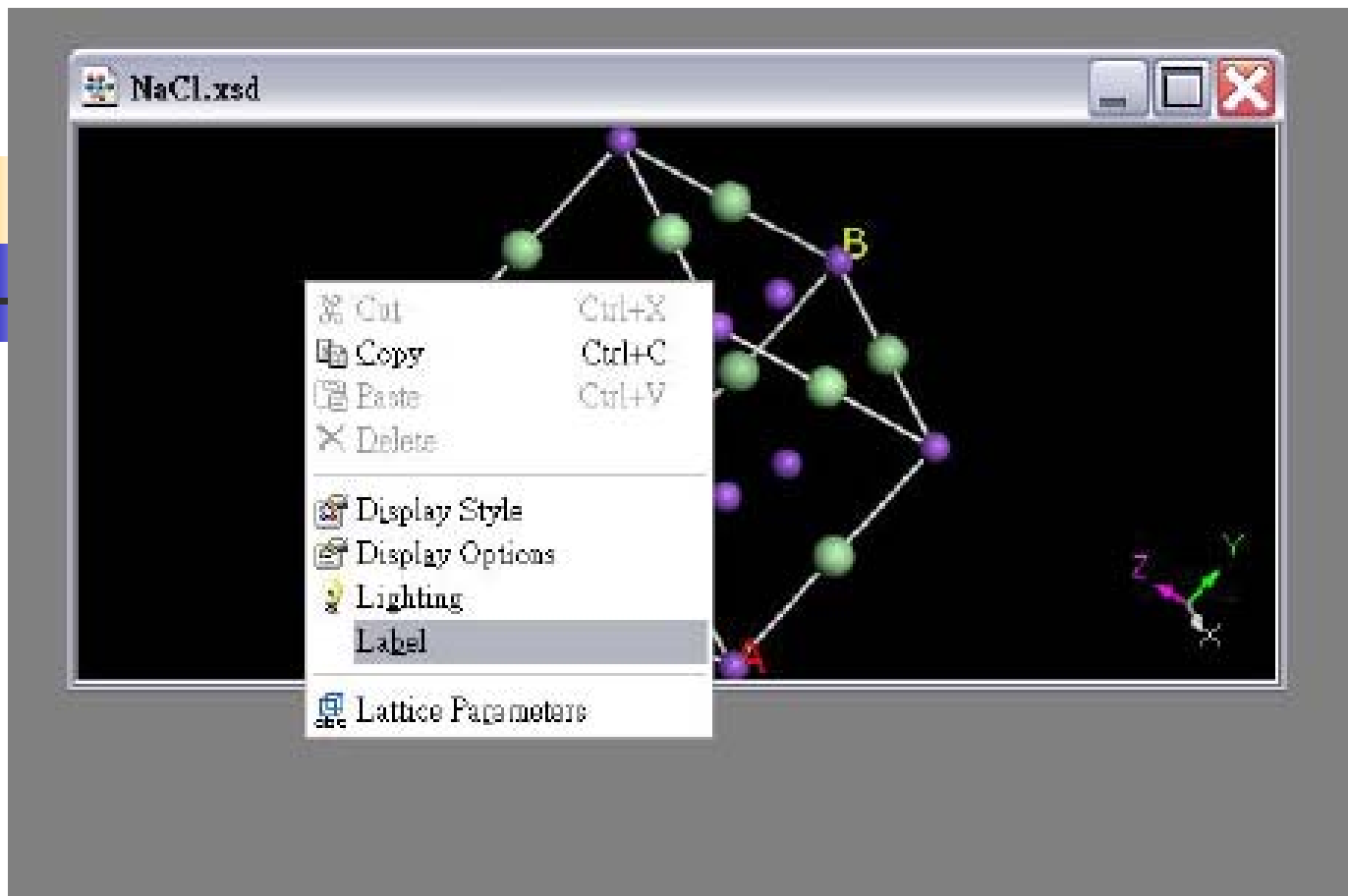
在3D视图上点击右键，菜单中选择Display Style，修改显示模式



原子颜色，
显示模式
（球棍模型，
棒状.....），
模型的大小等

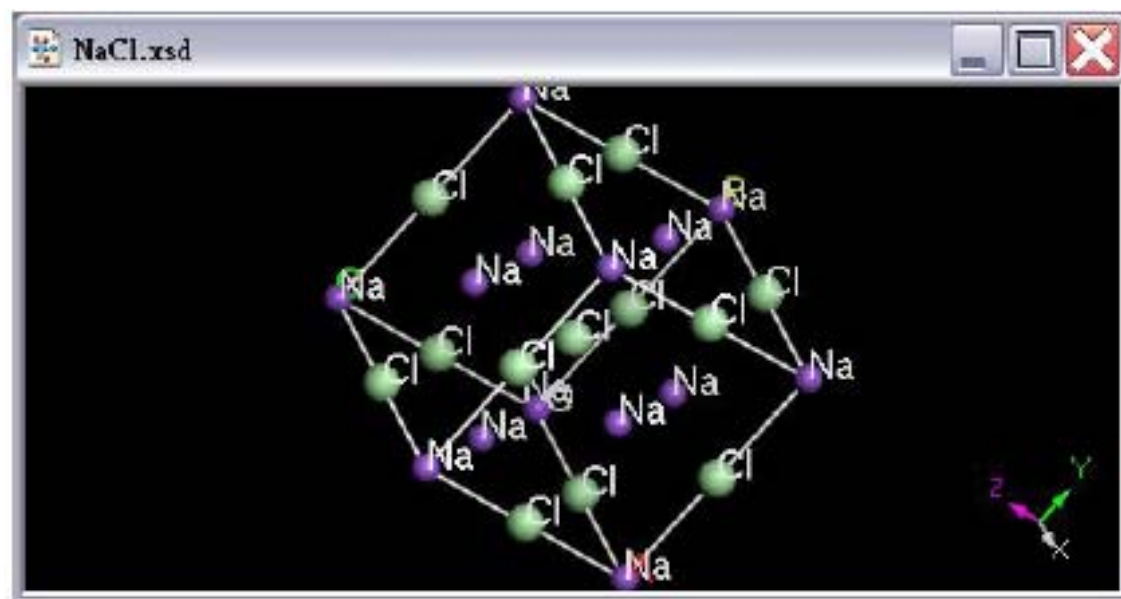
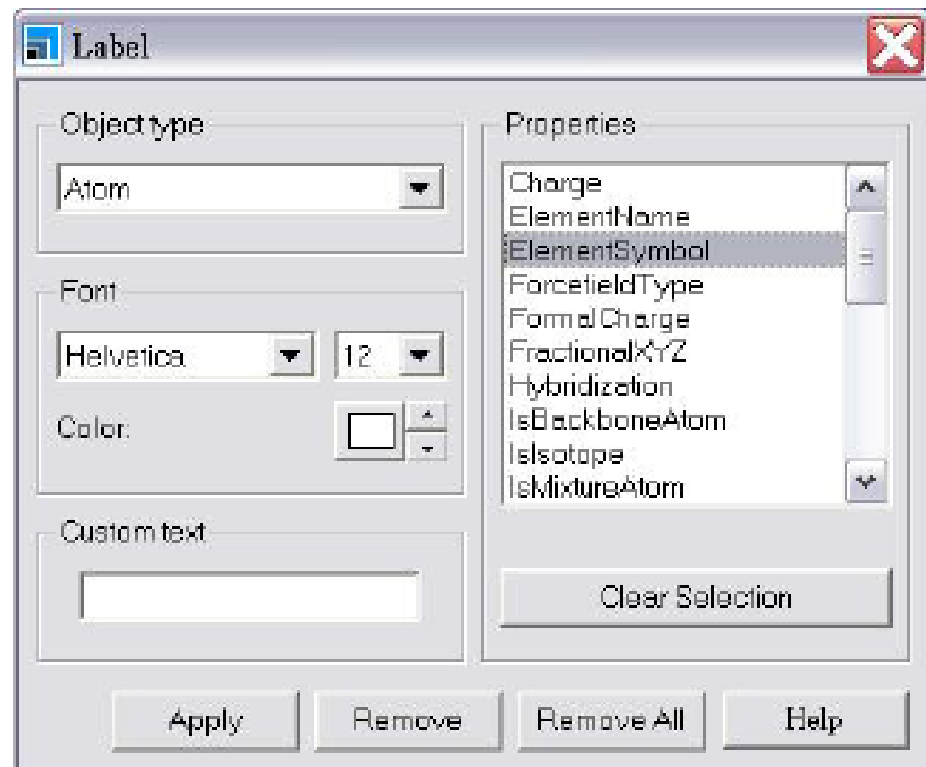


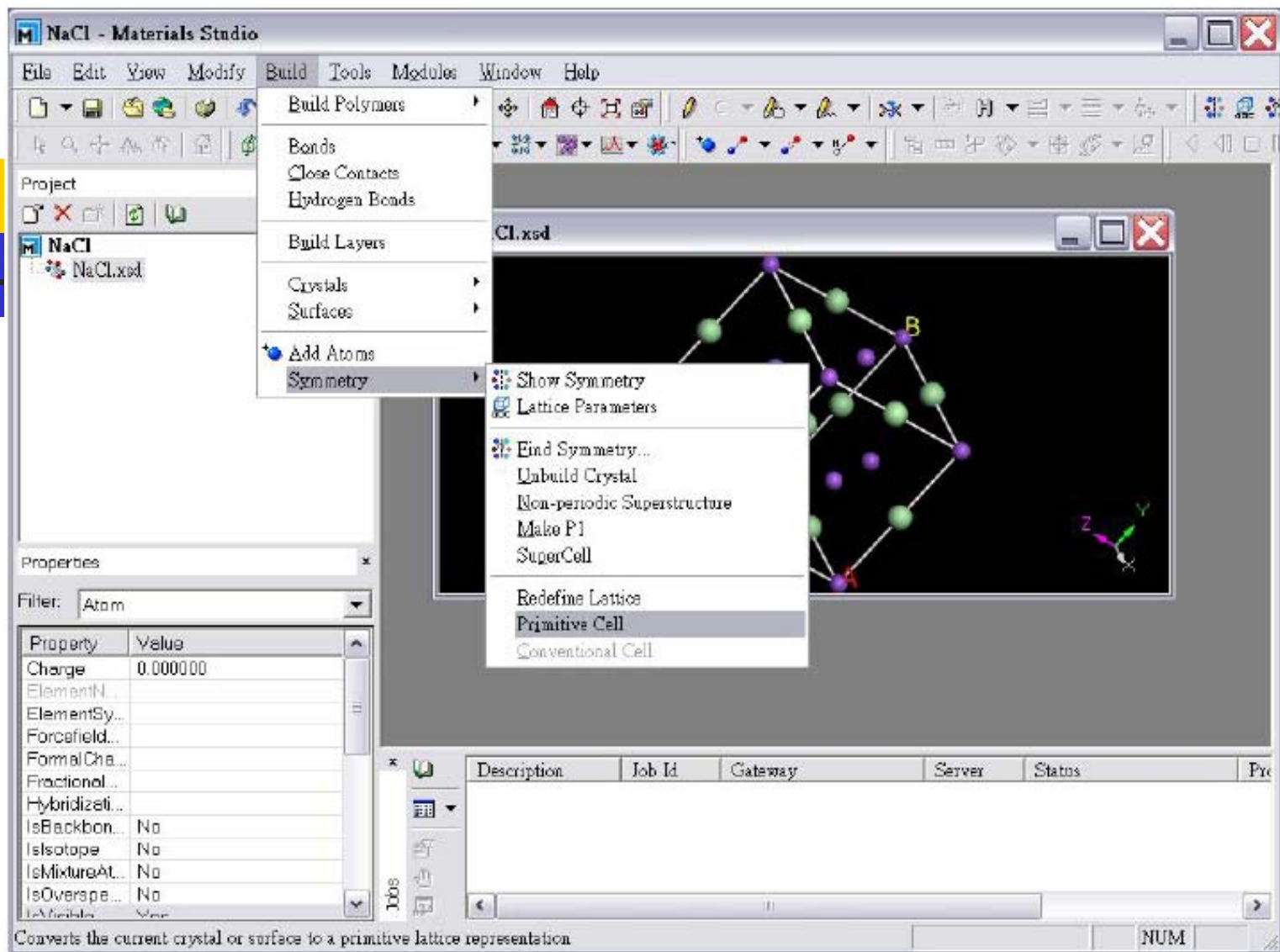
■ CPK显示模式



在3D视图上点击右键，菜单中选择Lable，对模型进行标注

Label选项





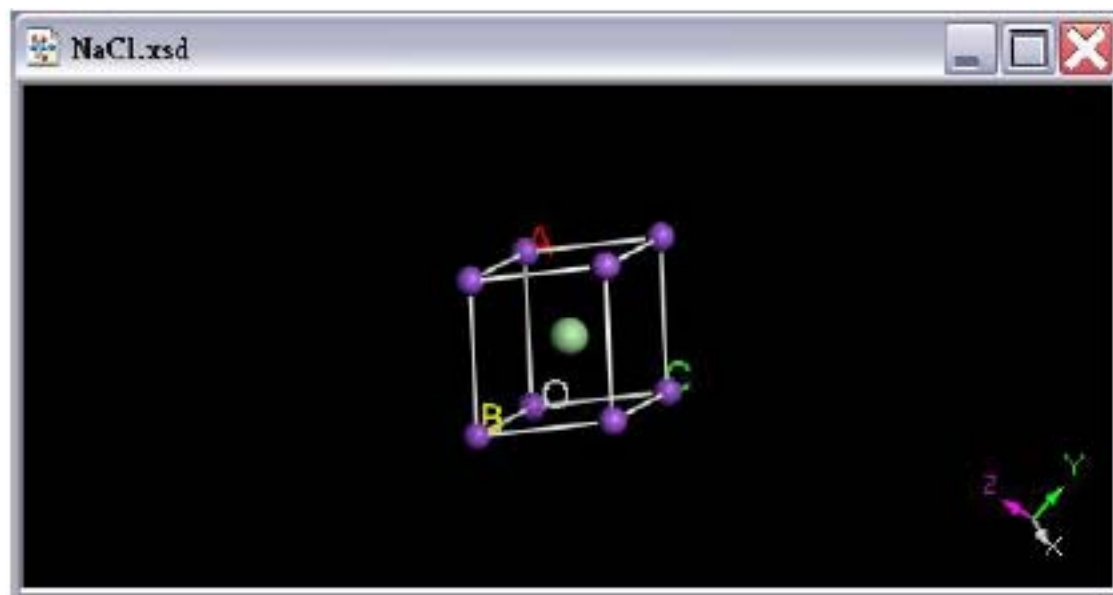
建立最小单胞，减少计算量

Primitive Cell





Filter: Symmetry System ▼

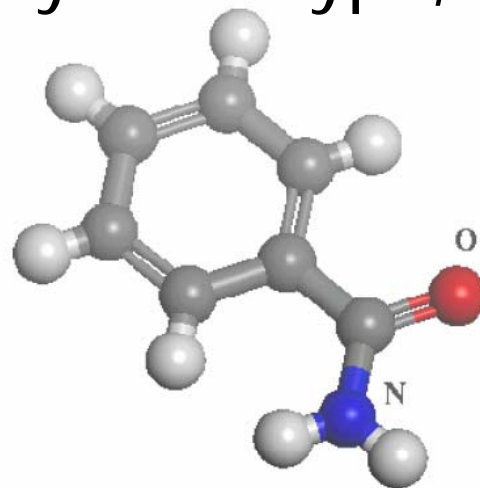
Property	Value
Cell Formula	Na Cl
Density	2.16374
IsVisible	No
Name	
NumberOf...	2
Style	None
Volume	44.8515

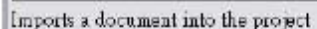
Double-click to edit



绘制3D 分子模型


- 1、画环。在草画工具条上单击sketch Ring 按钮
- 2、在六员环上添加酰胺基团。单击sketch Atom
- 3、编辑键型。选中sketch atom工具，点击要修改的化学键；或者按住shift键选择所有要修改的化学键，然后选择modify—modify bond type, 修改键型
- 4、加氢。Adjust hydrogen.
- 5、构型优化。点击clean





Import Document



搜尋位置 (I):  Documents



-  Examples
-  Structures

檔案名稱 (N):

檔案類型 (T): Common 3D Atomistic Files (*.xsd;*.xtd;*.msi;*)

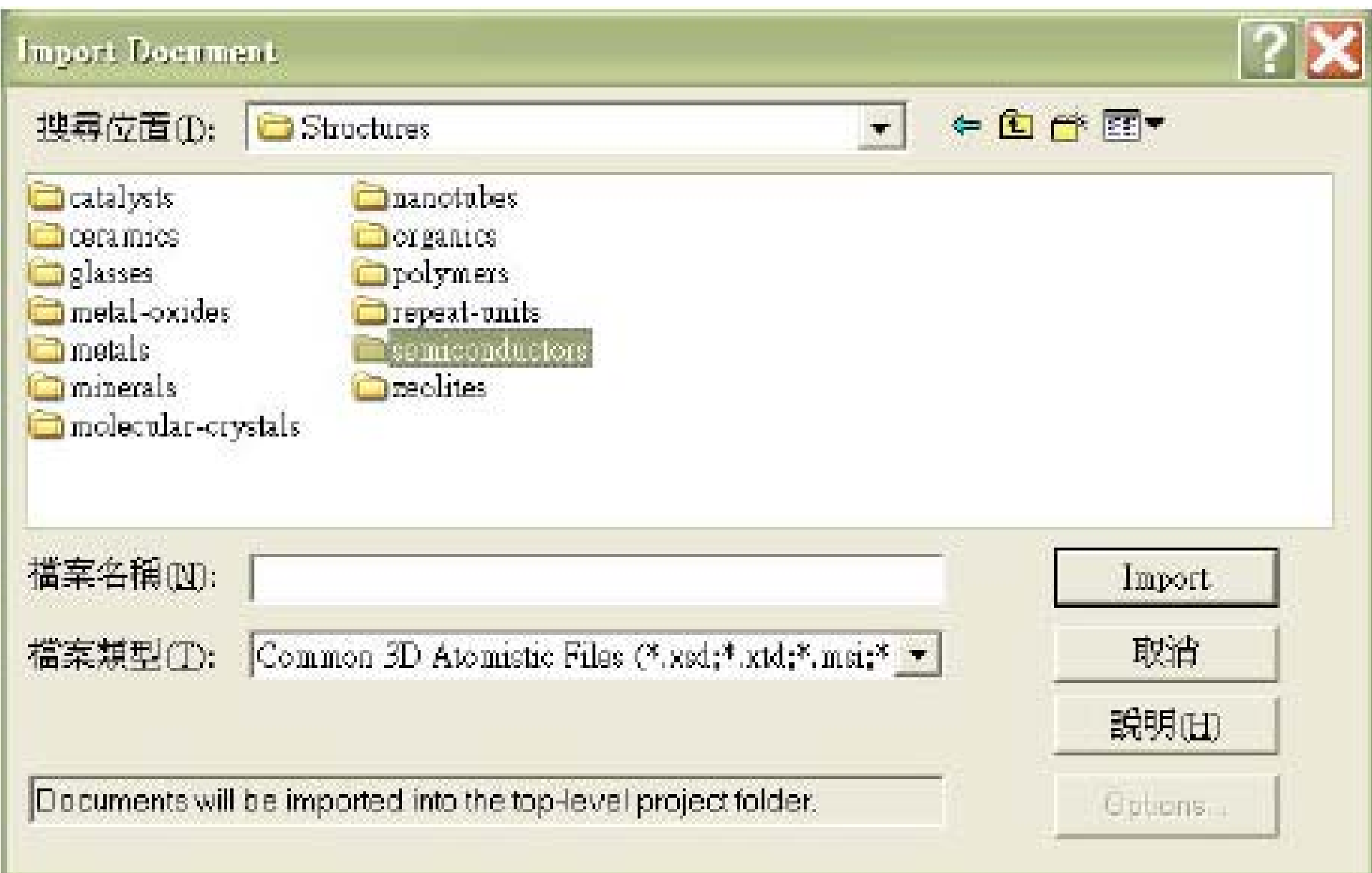
Import

取消

說明 (H)

Options...

Documents will be imported into the top-level project folder.



Import Document



搜尋位置 (I): semiconductors



- | | | | |
|------|------|------|----------|
| AlAs | BN | GaP | InP |
| AlP | BP | GaSb | InSb |
| AlSb | C | Ge | Si |
| BaAs | CdS | HgS | SiC_beta |
| BaS | CdSe | HgSe | Sn |
| BaSe | CdTe | HgTe | ZnO |
| BeTe | GaAs | InAs | ZnS |

檔案名稱 (N): Si

檔案類型 (T): Common 3D Atomistic Files (*.xtd;*.xtd;*.msi;*

Import

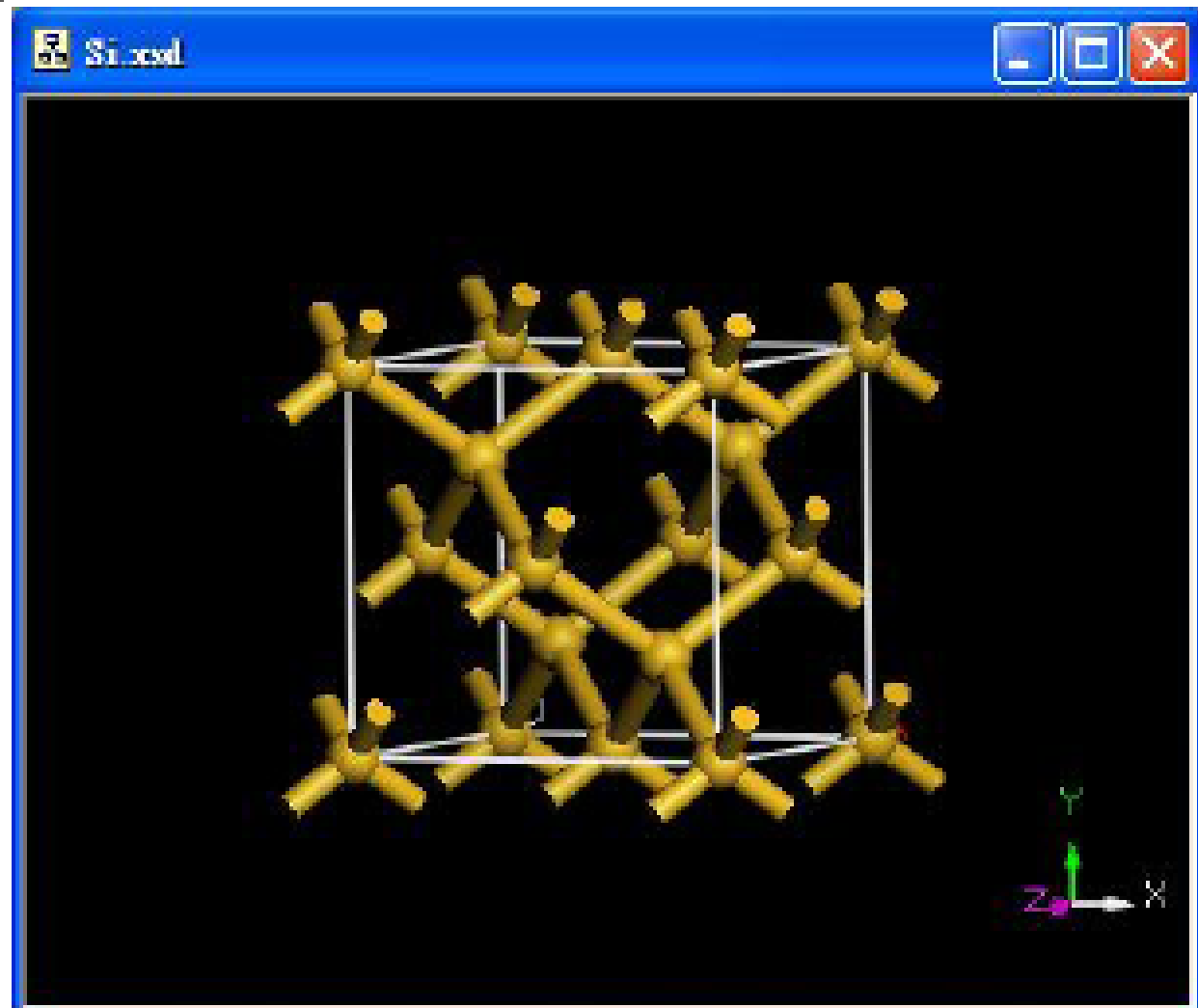
取消

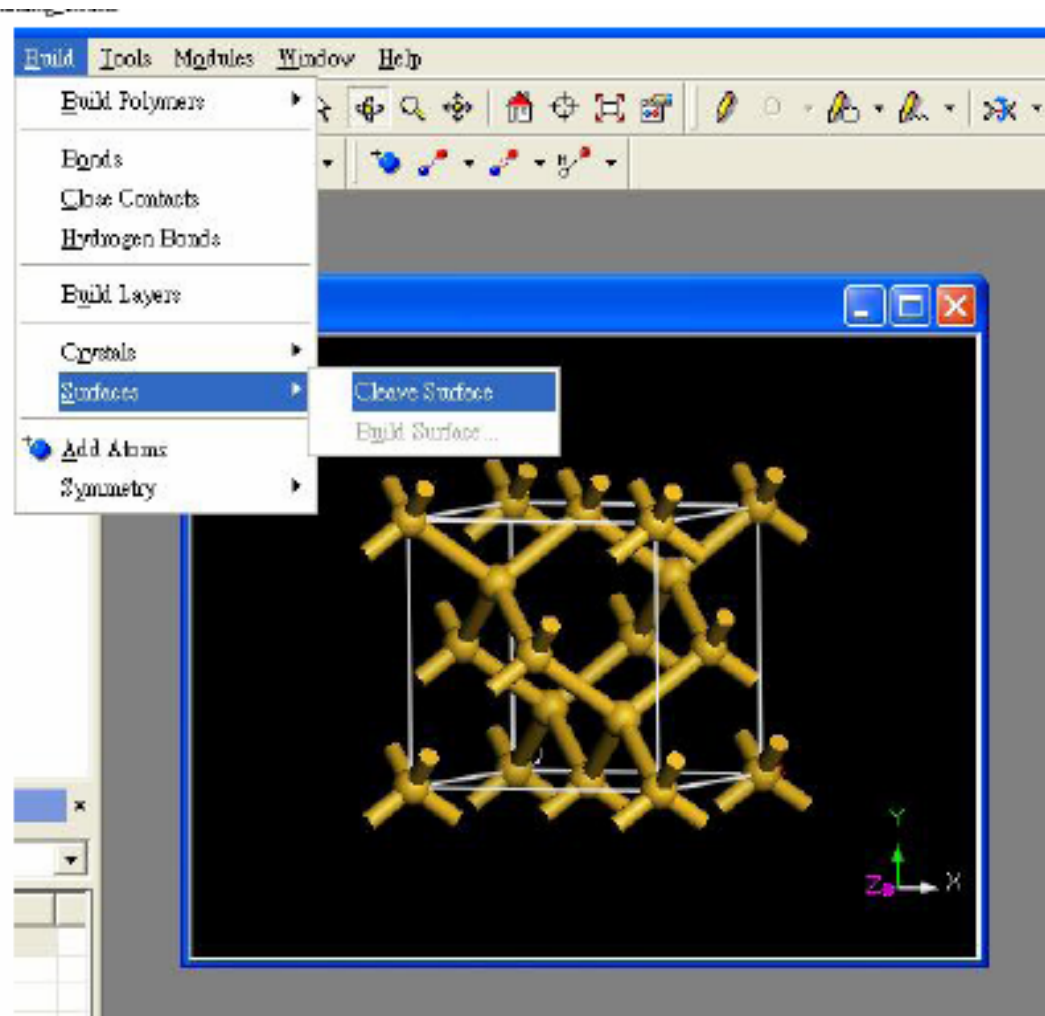
說明 (H)

Documents will be imported into the top-level project folder.

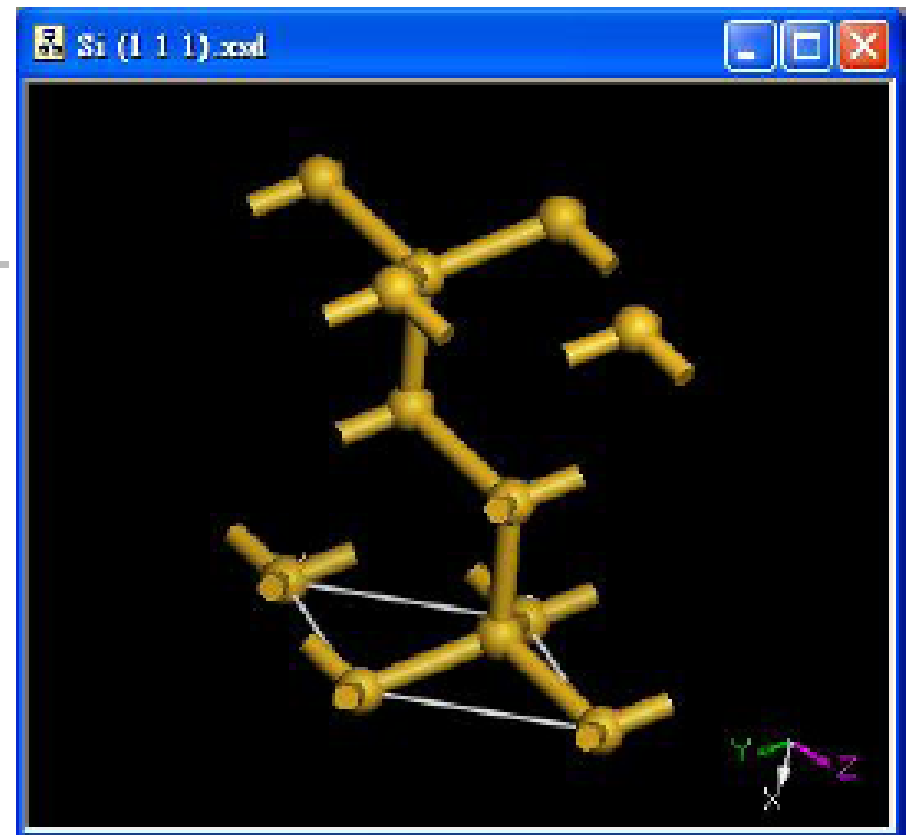
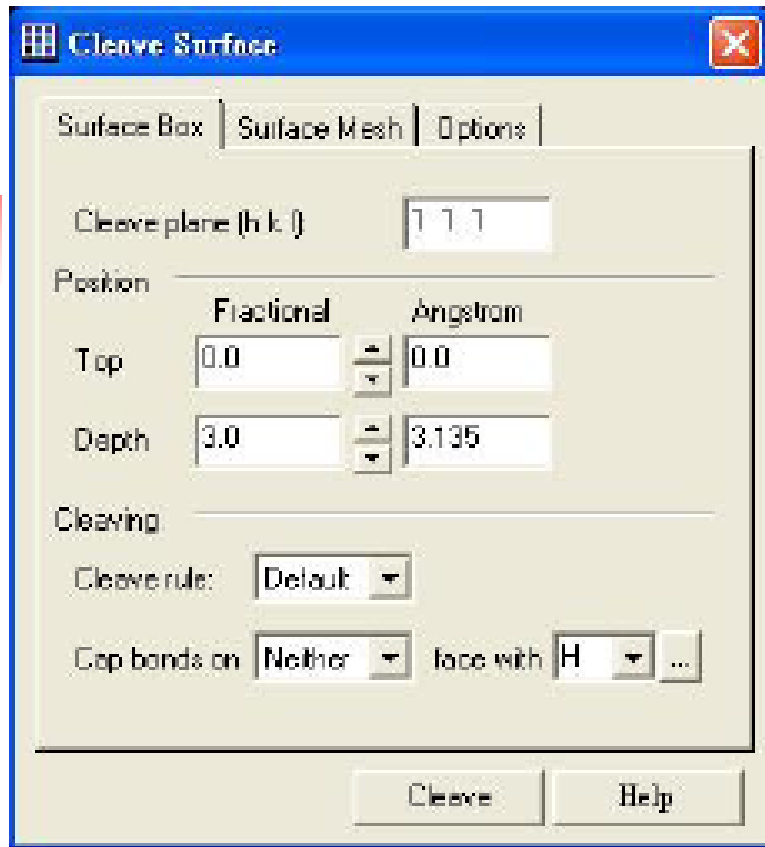
Options...

硅晶体结构

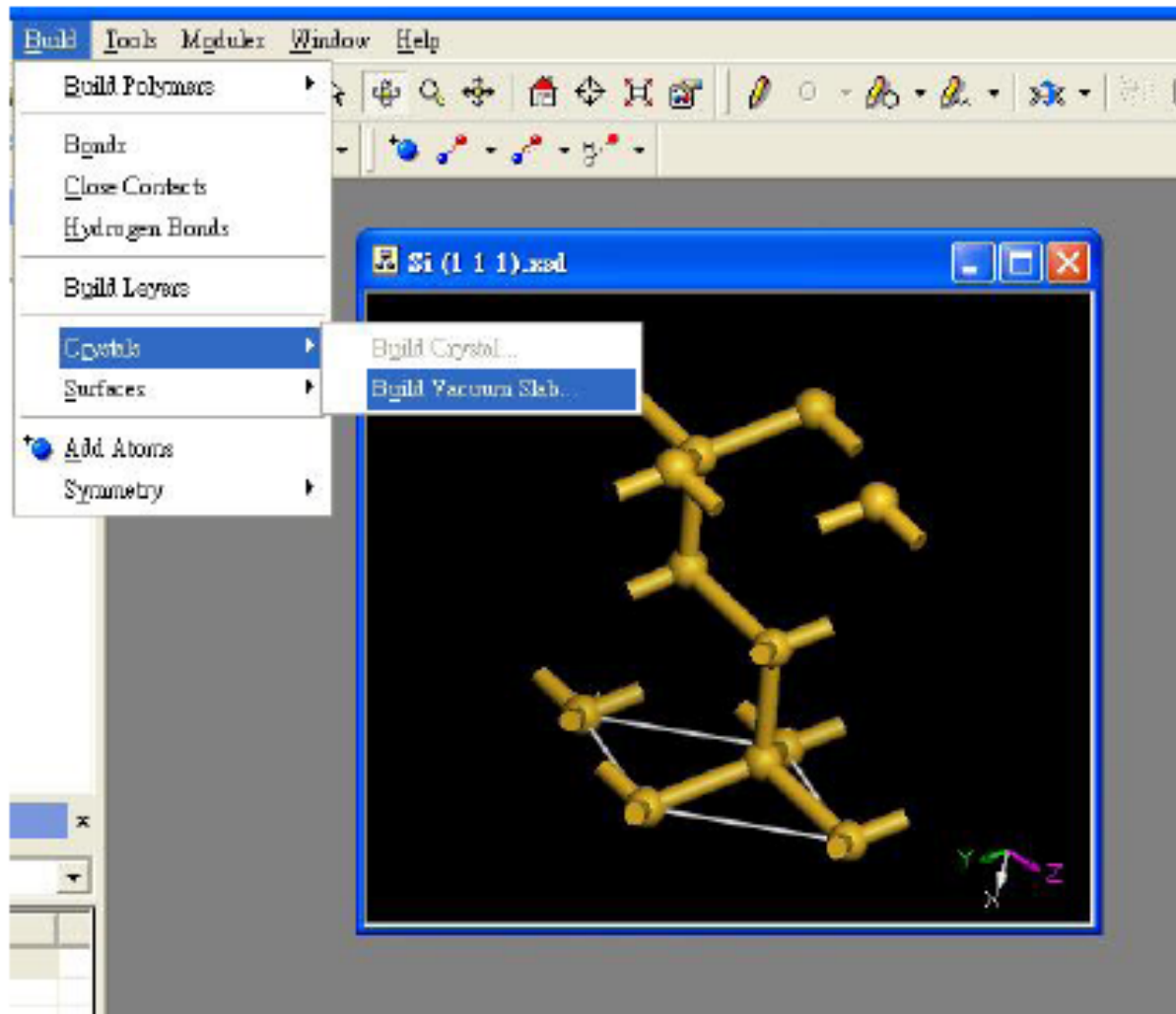




- Build — — surfaces — — cleave surface



输入所要的晶面参数，切入厚度



建立真空层，一般取厚度为10埃左右

Build Vacuum Slab Crystal

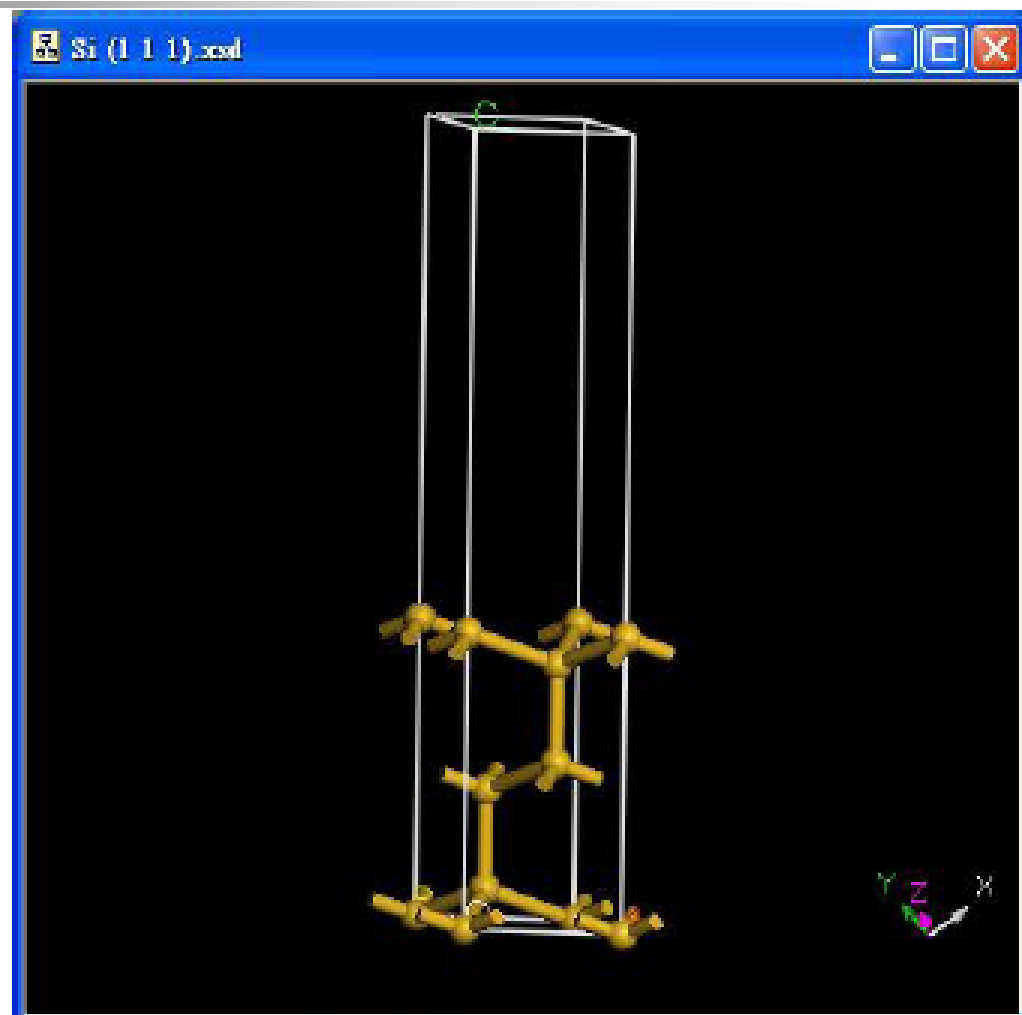
Vacuum Slab | Options |

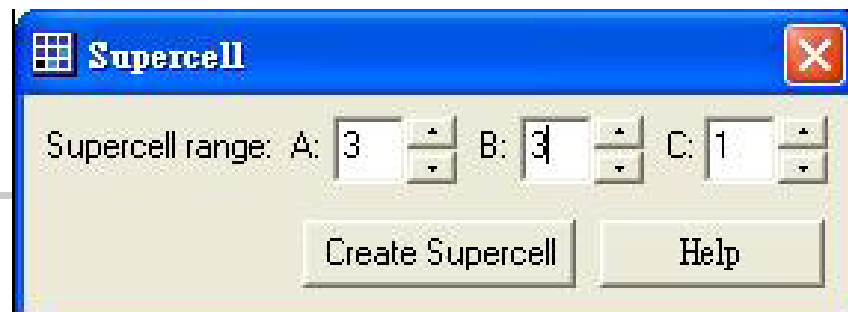
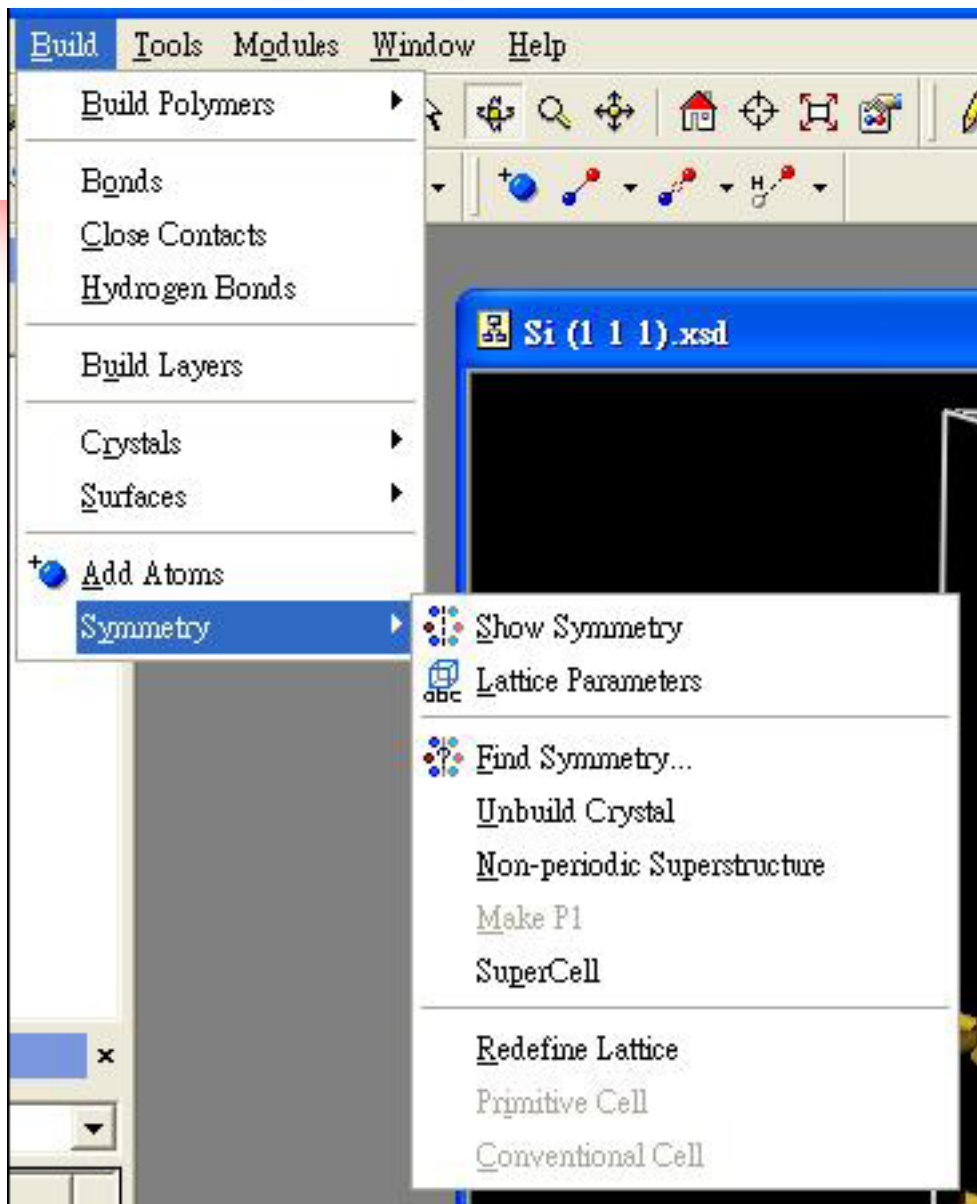
Vacuum orientation:

Vacuum thickness: Å

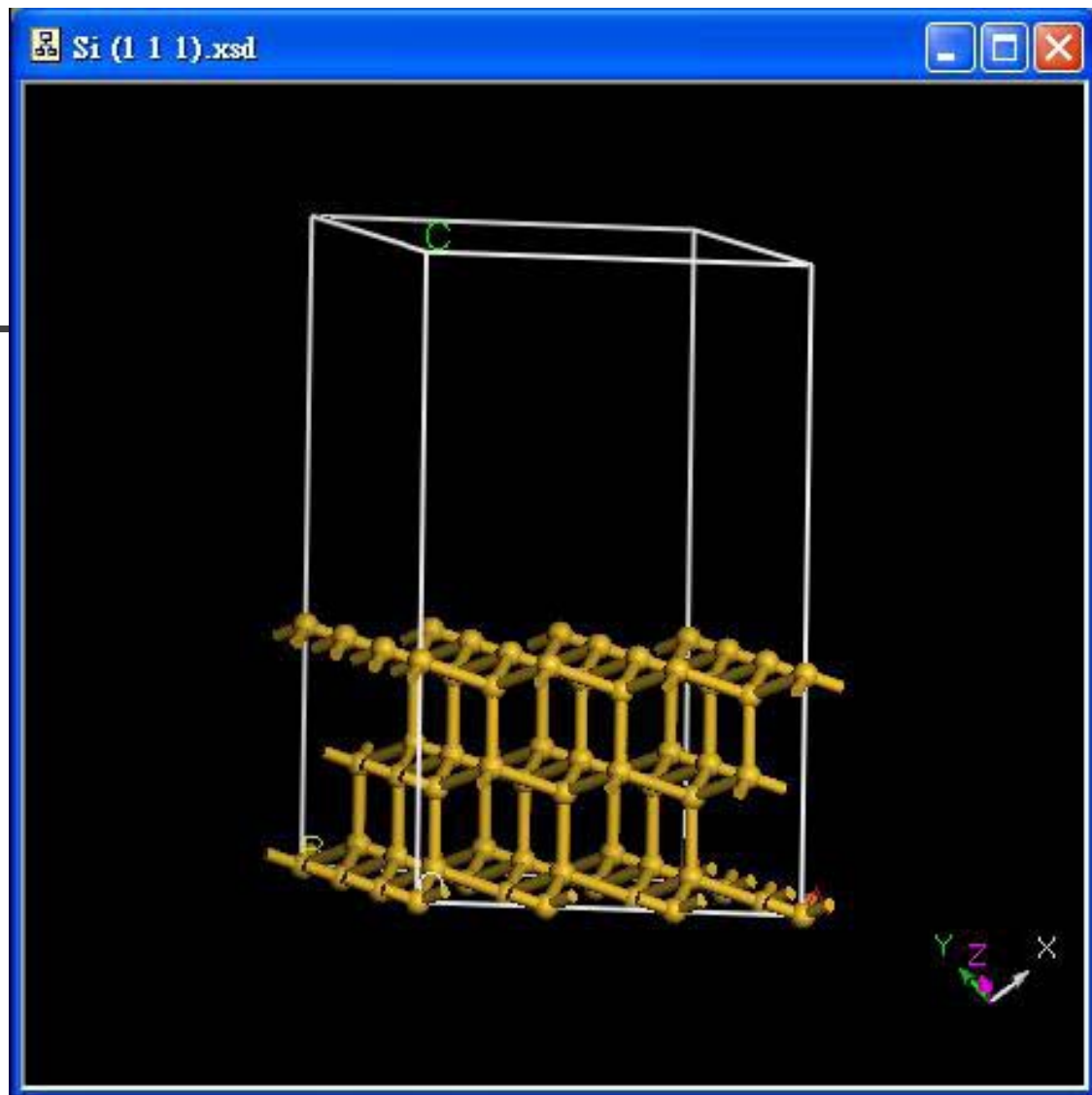
Crystal thickness: Å

Slab position: Å





- 建立超晶胞，以更好的考察晶面。取层厚为1，长宽各扩为原来3倍，



Si (1 1 1) 面



常用命令

2. 默认视图改变命令

功能

复位到原来位置

平移

平移

平移

缩放

放大

缩小

放大特定区域

绕 X Y 轴旋转

绕 Z 轴旋转

绕 X 轴旋转

绕 Y 轴旋转

Z 轴旋转

绕 X 轴顺时针旋转 45°

绕 X 轴逆时针旋转 45°

绕 Y 轴顺时针旋转 45°

绕 Y 轴逆时针旋转 45°

按键

Home

鼠标中键拖动

鼠标滚轮拖动

ALT + 鼠标右键拖动

鼠标左右键一起拖动

+

-

R + 左键拖动

窗口中间右键拖动

窗口边缘右键拖动

X + 右键拖动

Y + 右键拖动

Z + 右键拖动

向上键

向下键

向左

向右

3. Default selection:

功能

选定单个对象

取消选定

切换对象选择

加入选择对象

重新索套选取

切换索套选取

添加索套选取

重新开始矩形选取

切换矩形选取

加入矩形选取

取消选择

选择父结构

全部选择

同种类型的全部选定

按键

单击对象

空白处单击

CTRL + 鼠标单击

SHIFT + 鼠标单击

Q + 鼠标左键拖动

Q + CTRL + 鼠标左键拖动

Q + SHIFT + 鼠标左键拖动

E + 鼠标左键拖动

E + CTRL + 鼠标左键拖动

E + SHIFT + 鼠标左键拖动

CTRL + D

单击对象

CTRL + A

ALT + 双击对象

4. 默认结构编辑

功能

剪切

拷贝

粘贴

删除

X-Y 平面内平移选定的对象

X-Y 平面内平移选定的对象

相对屏幕水平移动选定对象

相对屏幕竖直移动选定对象

相对屏幕垂直移动选定对象

相对屏幕水平移动选定对象

相对屏幕竖直移动选定对象

相对屏幕垂直移动选定对象

沿着 XY 轴旋转选定对象

沿着 Z 轴旋转选定对象

绕 X 轴旋转选定对象

Rotate selected objects about Y

Rotate selected objects about Z

按键

CTRL + X

CTRL + C

CTRL + V

DELETE

SHIFT + 鼠标中间拖动

SHIFT + ALT + 鼠标右键拖动

SHIFT + X + 鼠标中间拖动

SHIFT + Y + 鼠标中间拖动

SHIFT + Z + 鼠标中间拖动

SHIFT + ALT- 鼠标水平移动

SHIFT + ALT- 鼠标竖直移动

SHIFT + ALT- Z- 鼠标移动

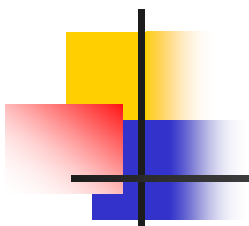
SHIFT + 鼠标右键在靠近窗口中央拖动

SHIFT + 鼠标右键窗口边缘拖动

SHIFT + X + 鼠标右键拖动

SHIFT + Y + 鼠标右键拖动

SHIFT + Z + 鼠标右键拖动



选择模式下:

功能

选择多个对象

取消选择

按键

鼠标左键拖过对象

鼠标左键在空白处拖动

旋转模式下:

功能

绕 XY 轴旋转

按键

鼠标左键拖动

缩放模式下:

功能

缩放

按键

鼠标左键拖动

草画原子模式下:

功能

开始添加原子

在已有原子上再加原子

创建化学键

XY 方向平移原子

合并两个原子

移动已画原子

前后移动已画的原子

改变已画化学键的长度

添加原子并停止草画

停止草画

停止草画

改变化学键的数目

在化学键中插入原子

替换元素

说明: 以上有些命令要注意按键顺序, 多试一下。

按键

空白处单击鼠标

在原子上单击

先后单击这两个原子

单击原子并拖动。

把一个拖到另一个上

鼠标拖动它

ALT + 鼠标左键拖动

SHIFT + ALT + 鼠标左键拖动

左键双击

ESC

单击活动窗口以外地方

单击化学键

ALT + 单击化学键

ALT + 单击原子



画环模式下:

功能

创建新环

创建芳香环

向已存原子上添加环

向已存原子上添加芳香环

把环加到已存化学键上

把芳香环加到已存化学键上

旋转已画环

选择新环的原子数目

按键

空白处单击

ALT + 空白处单击

此原子上单击

ALT + 单击此原子

单击化学键

ALT + 单击化学键

左键拖动

数字键 3-8



画原子团片段

功能

建立独立原子团

向原子上添加原子团

添加原子团并旋转

结合两个原子团片段

改变原子团结合点

“头上”原子指原子团中只有一个化学键的原子

按键

空白处单击

单击头上的原子

在头上原子单击并拖动

ALT + 分别单击两个原子团头上的原子

双击原子团头上的原子



测量/改变模式下:

功能

建立新的监视器

使能监视器

使监视器不活动

修改活动监视器

改变活动监视器中的固定原子

取消测量设定

取消测量设定

按键

单击原子或键

单击不活动的监视器

单击监视器

鼠标左键拖动

ALT + 鼠标左键拖动

ESC

活动窗口外单击

监视器就是设置的一个实时显示原子距离、角度、转矩的东西