

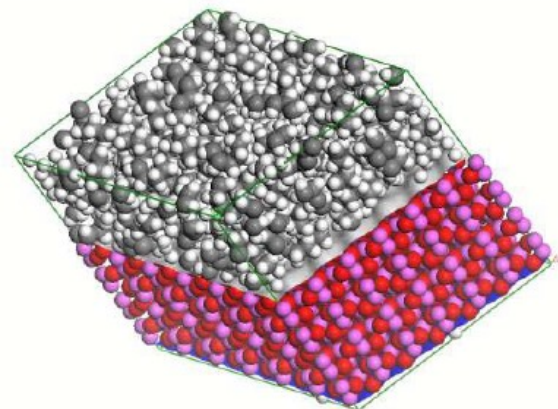
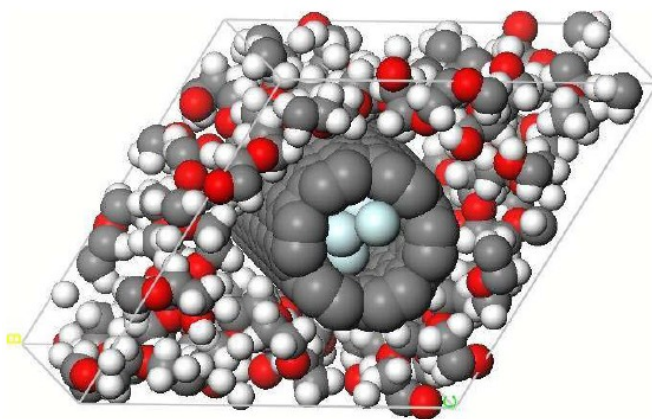
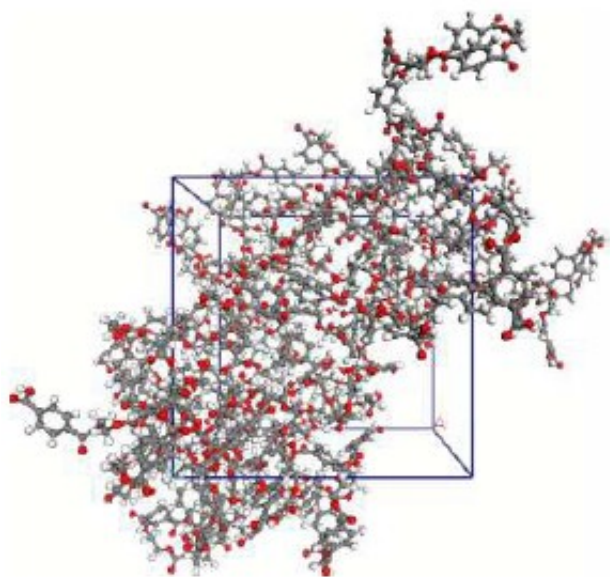


Materials Studio 培训

Amorphous cell模块的使用方法及应用

Amorphous cell构建复杂无定形模型

- 支持多种分子力场
- 可研究配比或者溶剂的影响
- **Monte Carlo**法建模
- 一般与**Forcite Plus**连用



内容:

- 1、基本理论介绍
- 2、输入文件参数设置
- 3、操作练习

基本原理介绍

分子力学

分子力学的基本原理就是分子力场由分子内相互作用和分子间相互作用两大部分构成，即力场的势能包括成键和非键相互作用，所有势能的总和即为分子的构象能。

$$E(\vec{R}) = \sum_{\text{bonded}} E_i(\vec{R}) + \sum_{\text{non-bonded}} E_i(\vec{R})$$

$$E_{\text{bonded}} = E_{\text{bond-stretch}} + E_{\text{angle-bend}} + E_{\text{rotate-along-bond}}$$

键伸缩能

键弯曲能

二面角扭转能

$$E_{\text{non-bonded}} = E_{\text{van-der-Waals}} + E_{\text{electrostatic}}$$

范德华作用能

静电作用能

分子势函数：

$$V(r^N) = \sum_{\text{bonds}} \frac{k_i}{2} (l_i - l_{i,0})^2 + \sum_{\text{angles}} \frac{k_i}{2} (\theta_i - \theta_{i,0})^2 + \sum_{\text{torsions}} \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \gamma))$$

$$+ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N (4\varepsilon_{ij} [(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}})^{12} - (\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}})^6] + \frac{q_i q_j}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}})$$

分子力场(Force Field)

AMBER力场

- Kollman group, 1984
- 最初仅为蛋白质和核酸体系提供相应的原子类型和力场参数
- 1990, 发展了适用于多糖模拟的力场参数 (Homan 1990)
- 1995, 2000, 加入了适用于有机小分子的原子类型和参数

CHARMm力场

- Karplus group, 1983
- 适用于各种分子性质的计算和模拟
- 对于从孤立的小分子到溶剂化的大生物体系的多种模拟体系都可以给出较好的结果
- 但不适合于有机金属配合物

CVFF力场

- Dauber-Osguthorpe group, 1988
- 适用范围包括有机小分子和蛋白质体系
- 扩展后可用于某些无机体系的模拟, 如硅酸盐、铝硅酸盐、磷铝化合物
- 主要用于预测分子的结构和结合自由能

MMFF94力场

- Hagler, 1996
- 定义了非常完备的原子类型
- 目前最为准确的力场之一
- 既适用于有机小分子, 也适用于大分子体系, 如蛋白质

MMX力场

- Allinger group, 1989
- 包括MM2和MM3
- 主要针对有机小分子
- 函数形式比较复杂，包含交叉项
- 也可用于生物大分子体系，但是速度会比较慢

CFF力场

- CFF91主要适用于模拟有机小分子、蛋白质以及小分子-蛋白质之间的相互作用
- CFF95除了适用于蛋白质和有机小分子体系，还可用于有机高分子体系的模拟，如聚碳酸酯及多糖
- PCFF在CFF91的基础上，还适用于聚碳酸酯、三聚氰胺甲醛树脂、多糖、核酸、分子筛等其他无机和有机材料体系的模拟。同时还提供20种金属离子的参数

COMPASS力场

- Sun group, 1994
- 针对凝聚态专门优化的分子势，用于分子力学研究
- 价参数和原子点电荷由ab initio数据拟合得到
- van der Waals参数通过对实验测得的内聚能和平衡密度数据的拟合得到
适合的范围包括有机和无机分子
- 精确、快速的预测体系的结构、构象、频率以及热物理性质
- **专门针对-ONO₂体系进行过优化，适合研究含能材料体系**

蒙特卡洛法 (Monte Carlo)

蒙特卡洛方法，或称计算机随机模拟方法，是一种基于“随机数”的计算方法。在分子科学中，分子体系中存在大量的不确定问题：重复单元的分布、构象分布等。因此，在进行模型搭建时使用了Monte Carlo随机抽样方法。

模拟步骤：

- ★ 使用随机数发生器产生一个随机的分子构型。
- ★ 对此分子构型的其中粒子坐标做无规则的改变，产生一个新的分子构型。
- ★ 计算新的分子构型的能量。
- ★ 比较新的分子构型于改变前的分子构型的能量变化，判断是否接受该构型。
- ★ 若新的分子构型能量低于原分子构型的能量，则接受新的构型，使用这个构型重复再做下一次迭代。
- ★ 若新的分子构型能量高于原分子构型的能量，则计算玻尔兹曼常数，同时产生一个随机数。
- ★ 若这个随机数大于所计算出的玻尔兹曼因子，则放弃这个构型，重新计算。
- ★ 若这个随机数小于所计算出的玻尔兹曼因子，则接受这个构型，使用这个构型重复再做下一次迭代。
- ★ 如此进行迭代计算，直至最后搜索出低于所给能量条件的分子构型结束。

输入文件参数设置

Amorphous cell的参数设置

Setup菜单

- Construction 构建
- Packing 填充
- Confined Layer 夹层

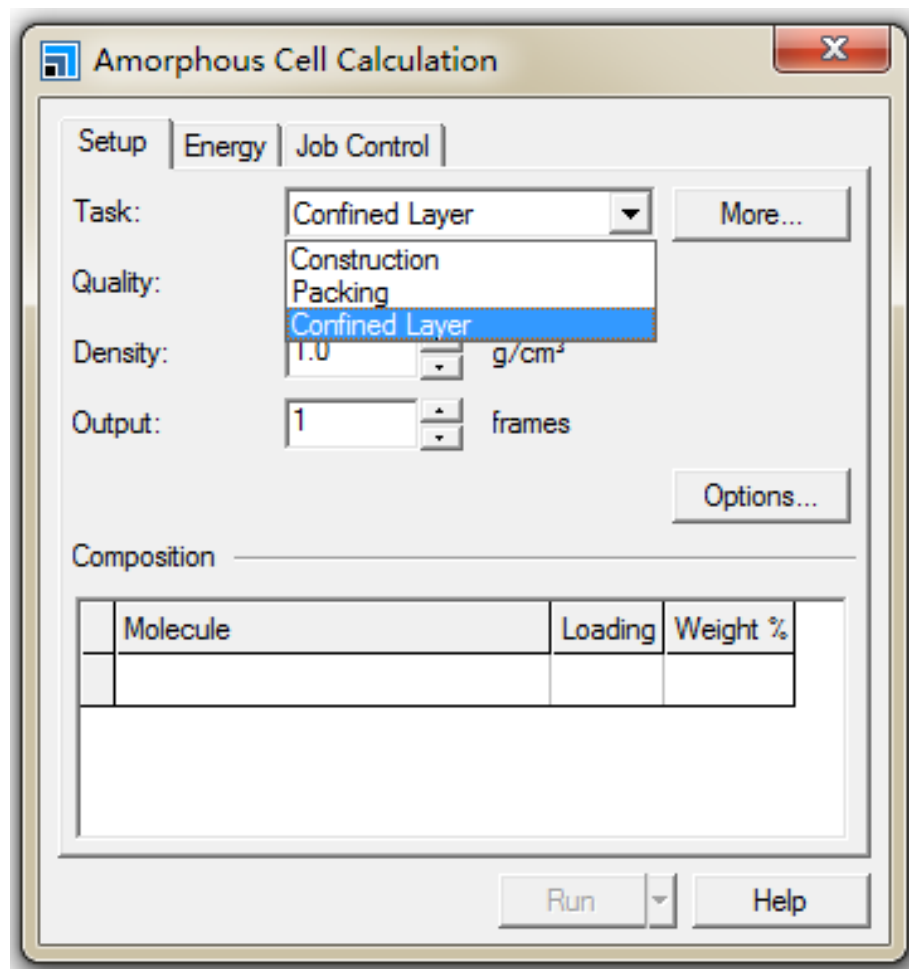
Quality : 控制全局计算精度

Density : 设定模型的密度

Output : 设定输出的帧数

Composition :

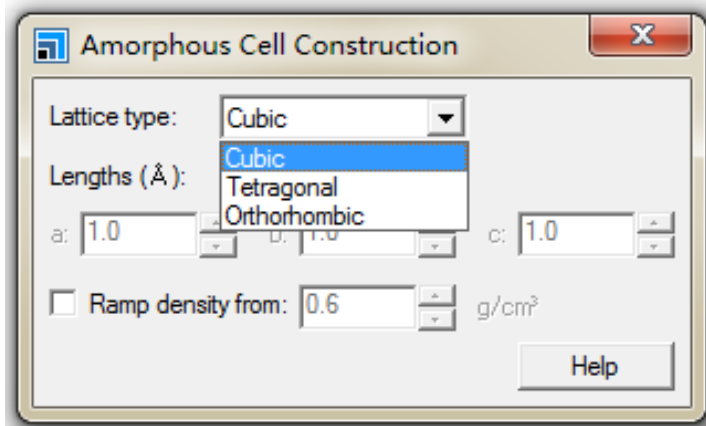
设定无定形模型中的分子及其数量



Amorphous cell的参数设置

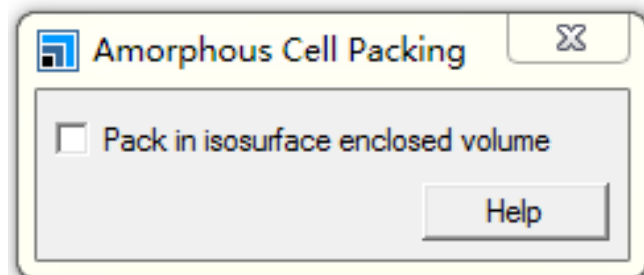
Setup菜单-----Construction/More

- 单胞类型 (Lattice type)
立方 (Cubic) ; 四方 (Tetragonal); 单斜 (Orthorhombic)
- 单胞长度参数 (Length)
- 初始密度 (Ramp density from)



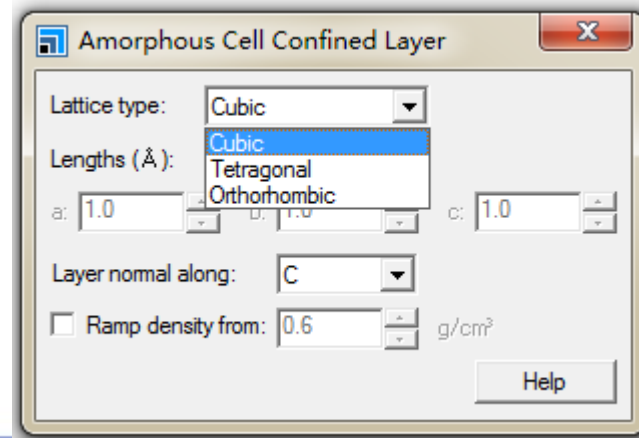
Setup菜单-----Packing/More

- 是否在isosurface包含的体积内填充分子



Setup菜单-----Confined Layer/More

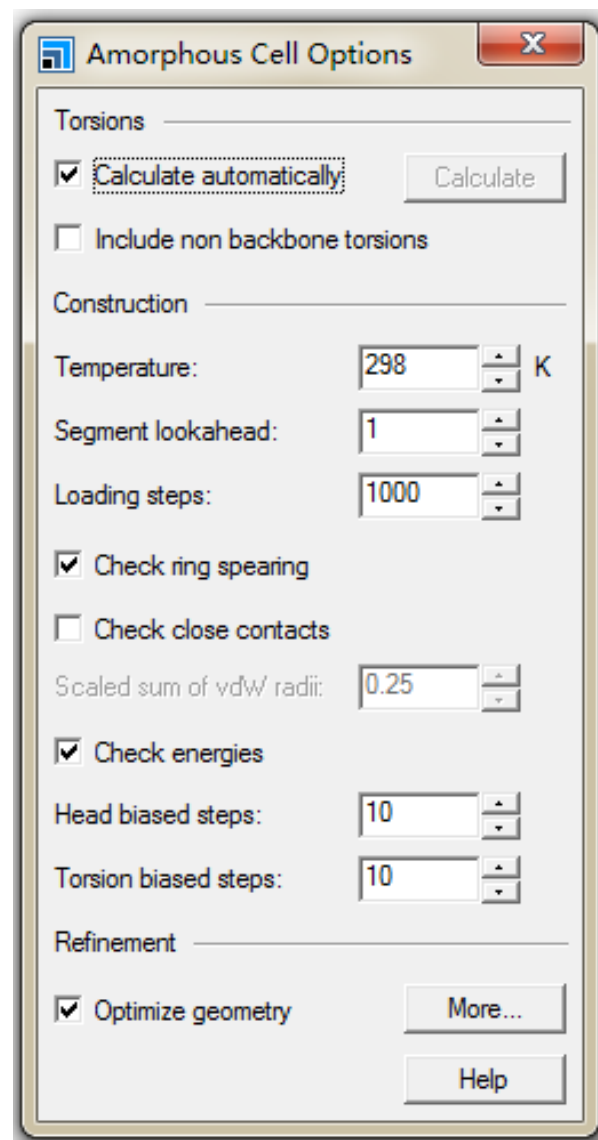
- 单胞类型(Lattice type)
立方(Cubic) ; 四方(Tetragonal); 单斜 (Orthorhombic)
- 单胞长度参数(Length)
- 限制层取向(Layer normal along)
- 初始密度(Ramp density from)



Amorphous cell的参数设置

Setup菜单-----Options

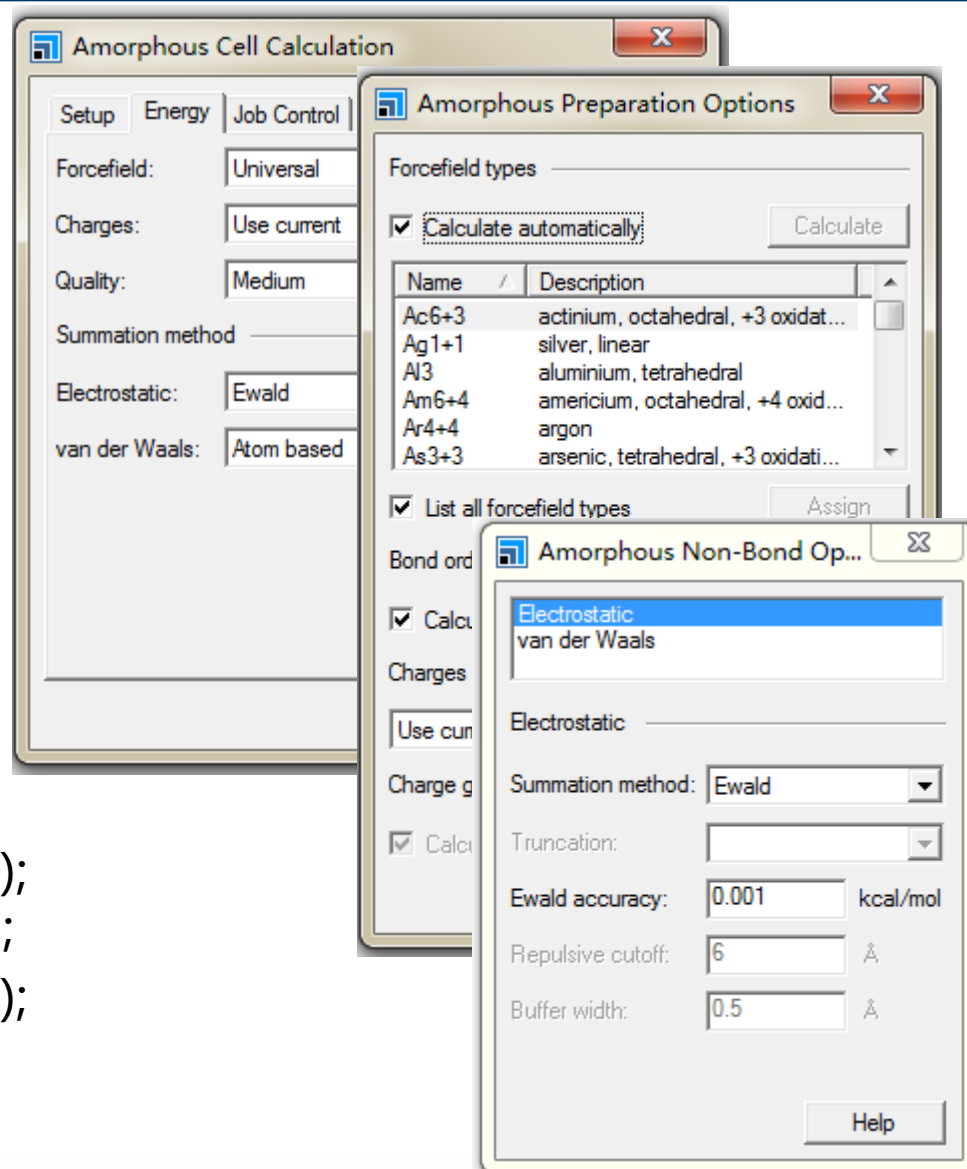
- 扭矩 (Torsions)
选择后，计算分子骨架扭曲自由度；不选，当成刚性球处理
- 包括非骨架扭矩 (include non backbone torsions)
- 温度 (Temperature)
- 分隔段数 (Segment Lookahead) 默认1
- 最大步数 (Loading steps)
- 检查穿过链环情况 (Check ring spearing)
- 检查密切接触程度 (Check close contacts)
- 评估能量 (Check energies)
- 每个分子位置和取向的取样次数 (head biased steps)
- 每个分子扭矩的取样次数 (Torsions biased steps)
- 几何优化 (Optimize geometry)



Amorphous cell的参数设置

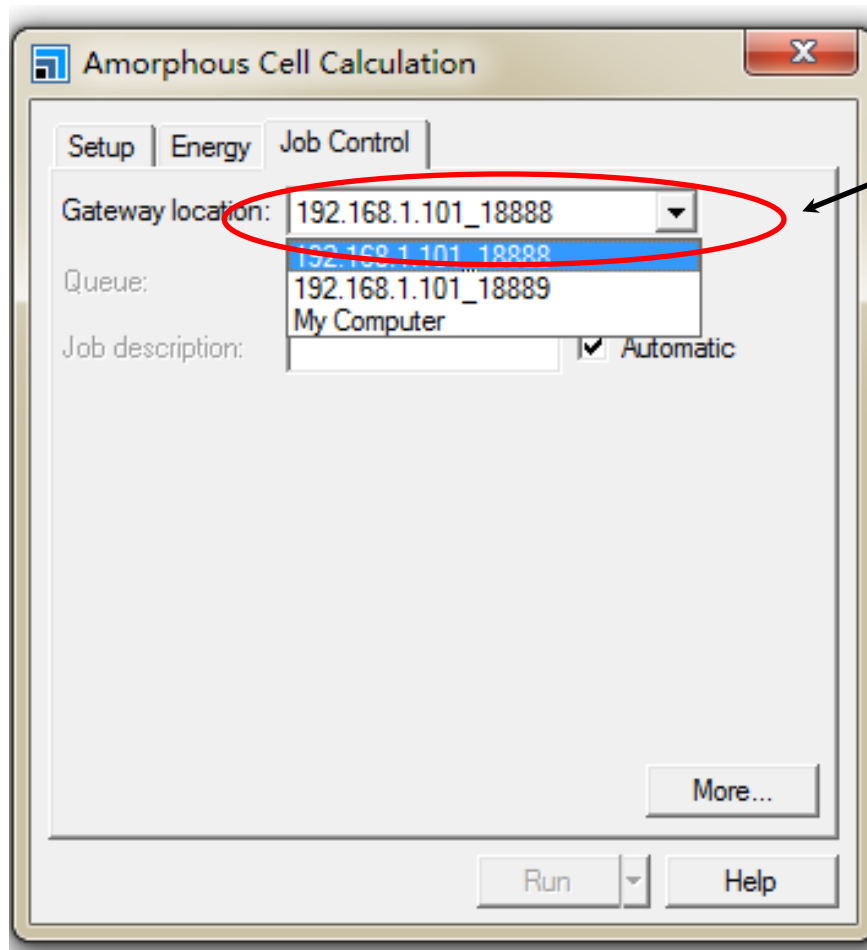
Energy 菜单

- 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—原子截断(Atom based);
电荷组截断(Group based); Ewald截断 ;
非键相互作用—原子截断(Atom based);



Amorphous cell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。

A row of computer monitors on a desk, viewed from the side. The monitors are black and arranged in a line, receding into the distance. The desk is light-colored wood. The background is a bright blue sky with wispy white clouds. The text '操作手册' is overlaid in the top left corner, and 'training' is overlaid in a large, semi-transparent font across the middle of the image.

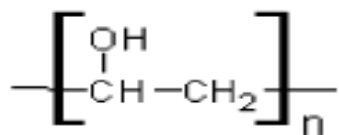
操作手册

MS Amorphous cell

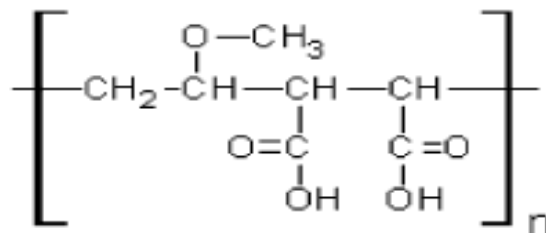
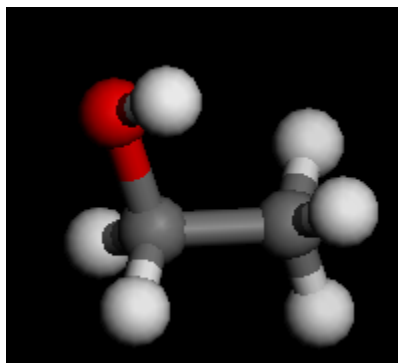
1. 无定型聚合物模型搭建

1) 构建单体结构

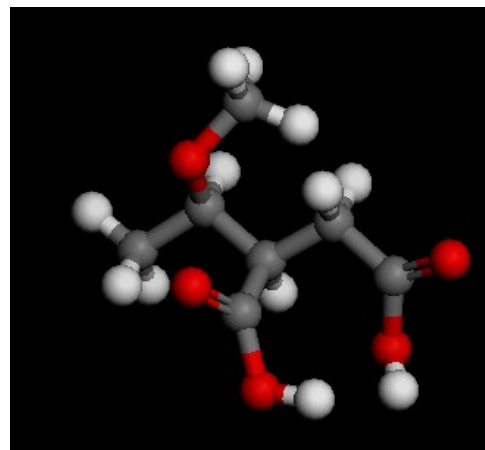
PVOH (聚乙烯醇) 和 PMVE-MA (聚(甲基乙烯醚酸-联合-顺丁烯酸))



PVOH



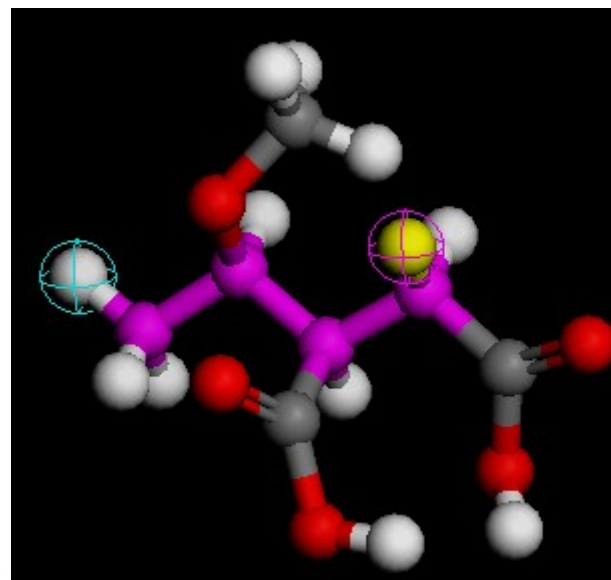
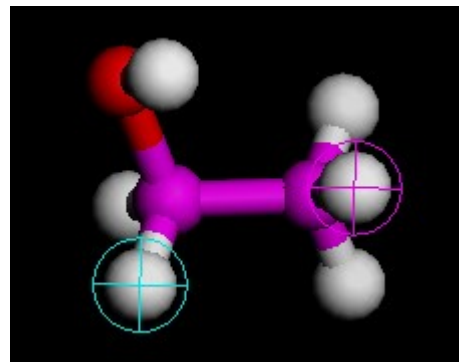
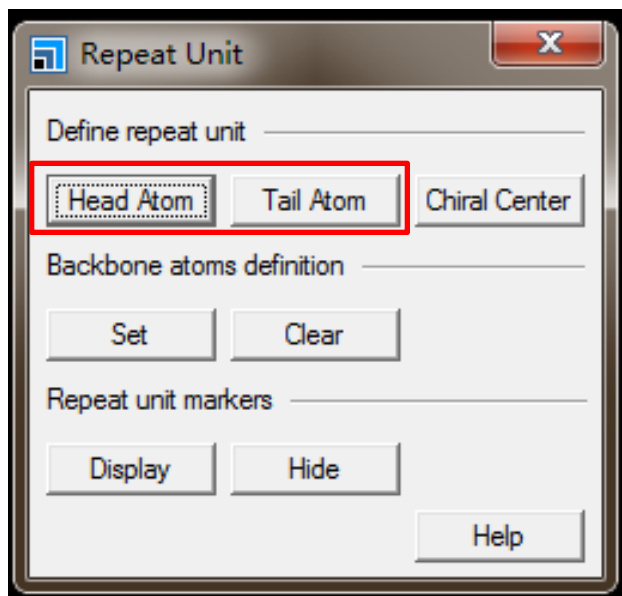
PMVE-MA



注：氧原子(红色)，碳原子(深灰色)，氢原子(白色)，其它图类似。

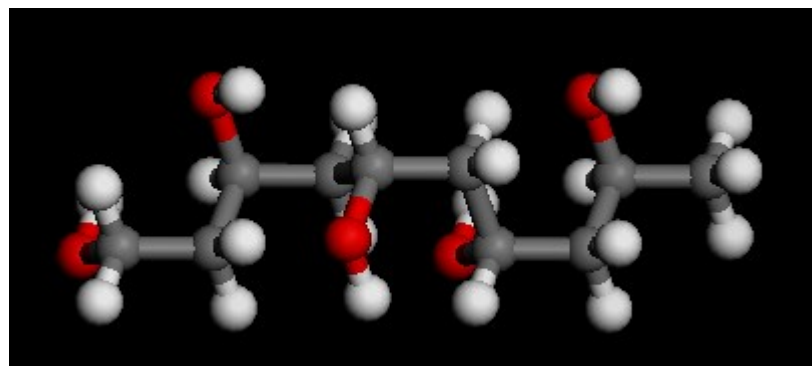
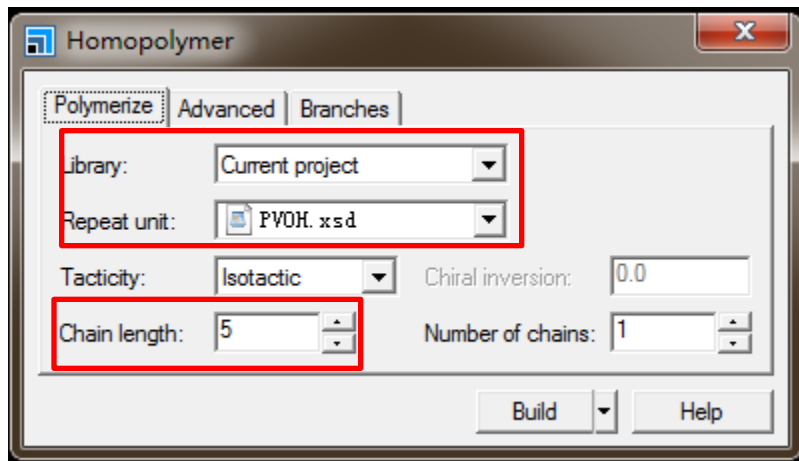
2) 定义连接的头尾原子，构建PVOH (聚乙烯醇) 和 PMVE-MA (聚(甲基乙烯醚酸-联合-顺丁烯酸)) 的重复单元

在菜单中选择Build/Build Polymers/Repeat Unit

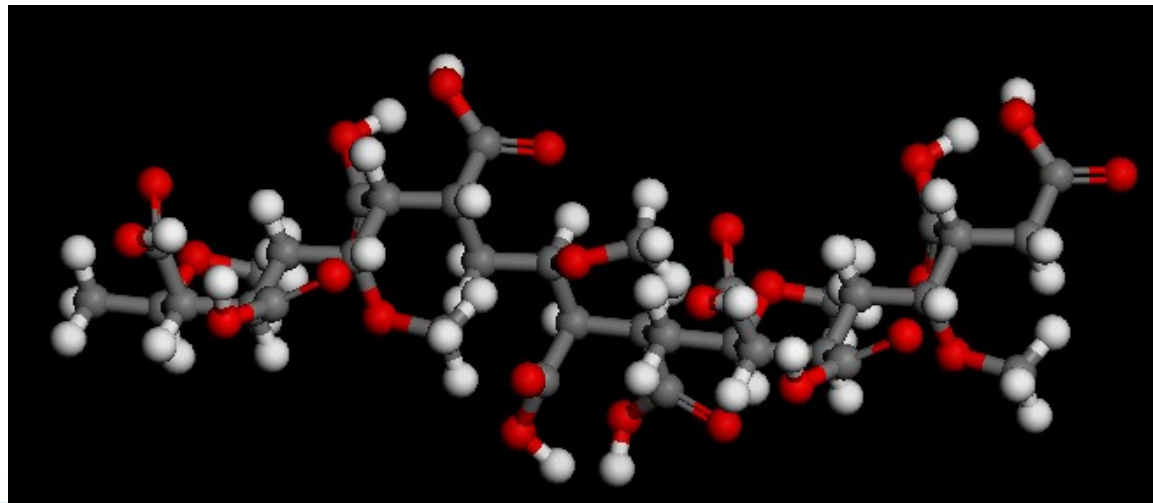


3).使用如上的重复单元，构建聚合度为5的PVOH (聚乙烯醇) 和 PMVE-MA (聚(甲基乙烯醚酸-联合-顺丁烯酸))

在菜单中选择Build/Build Polymers/Homopolymer

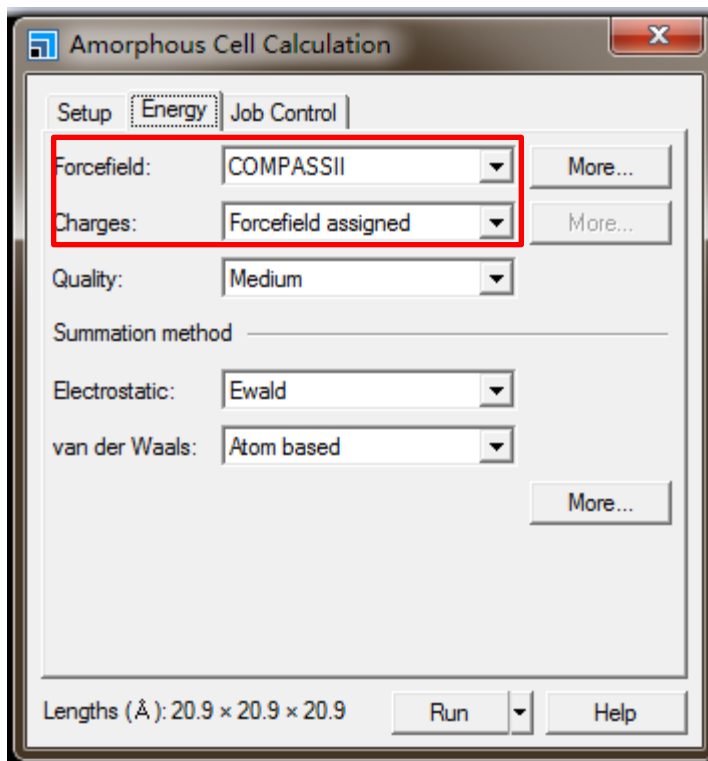
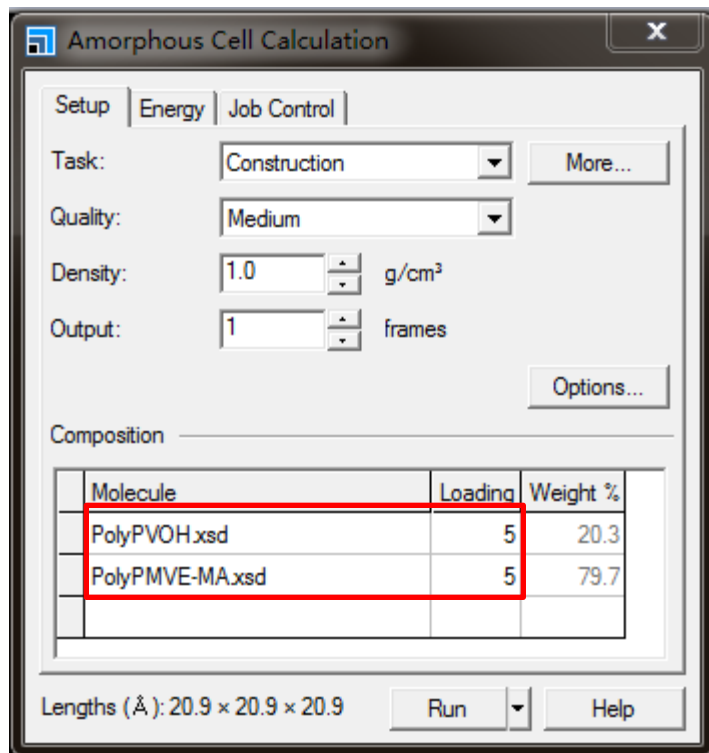


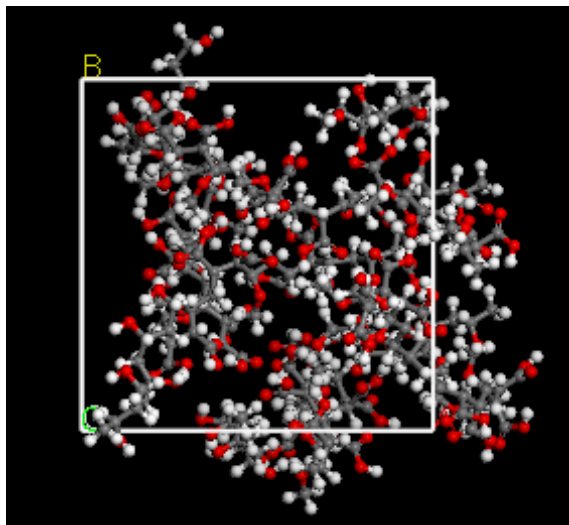
PVOH



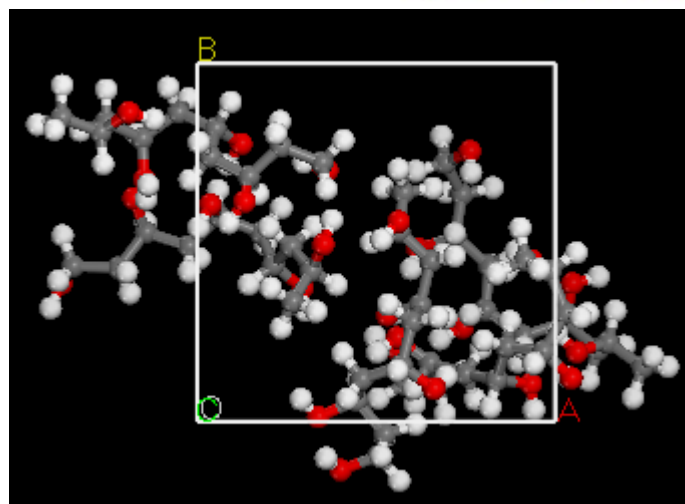
PMVE-MA

4) 使用Amorphous Cell模块，利用上面搭建搭建好的聚合物，进行混合无定型体系的搭建。

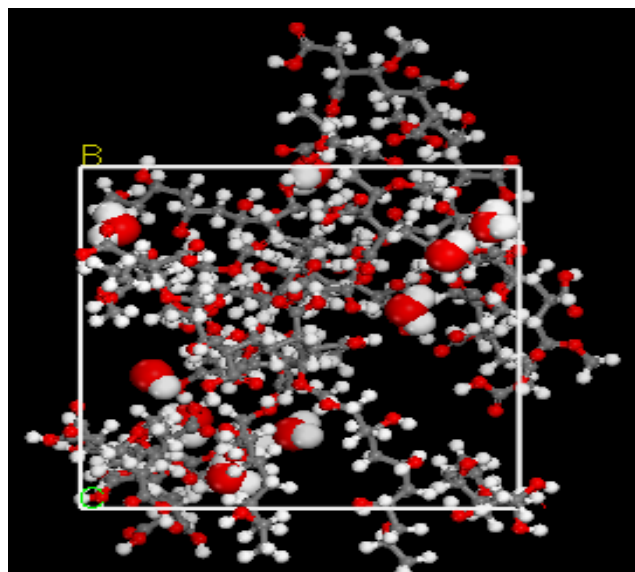




5个PVOH 和5个 PMVE-MA



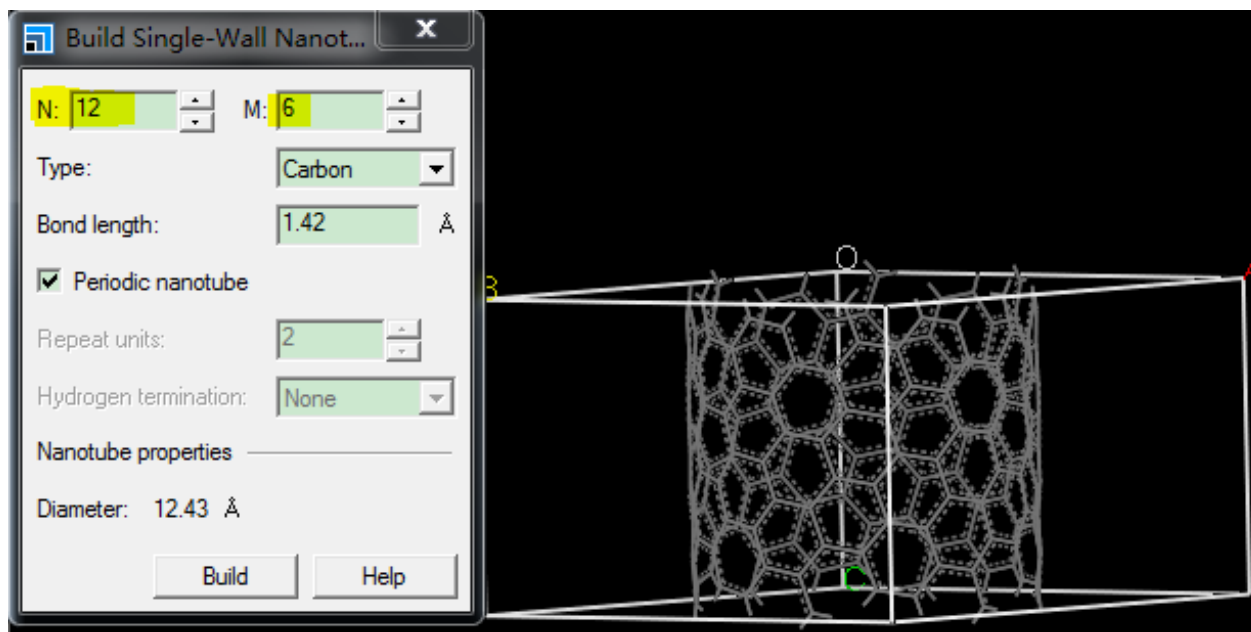
5个PVOH



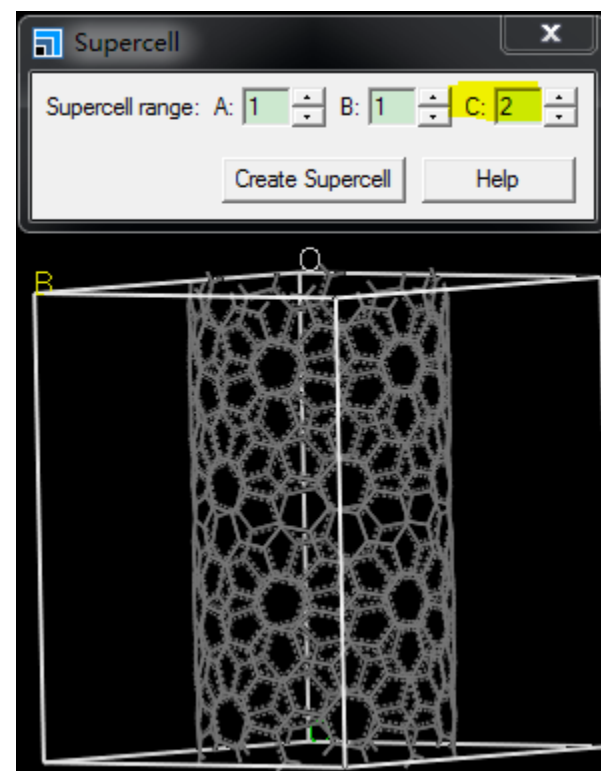
含水分子的聚合物体系

2、向纳米管中填充水

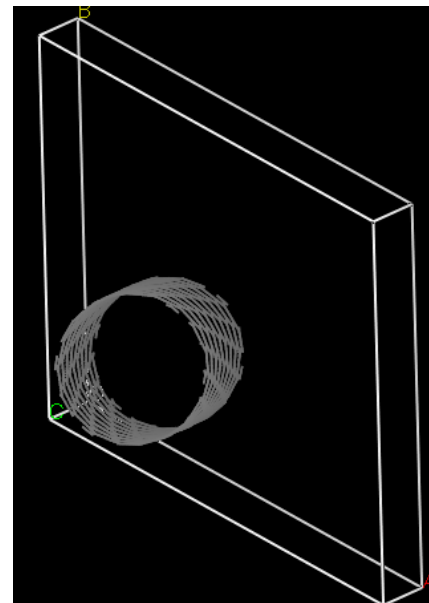
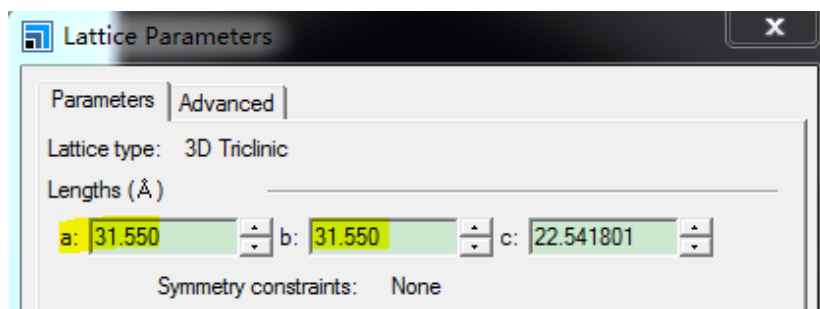
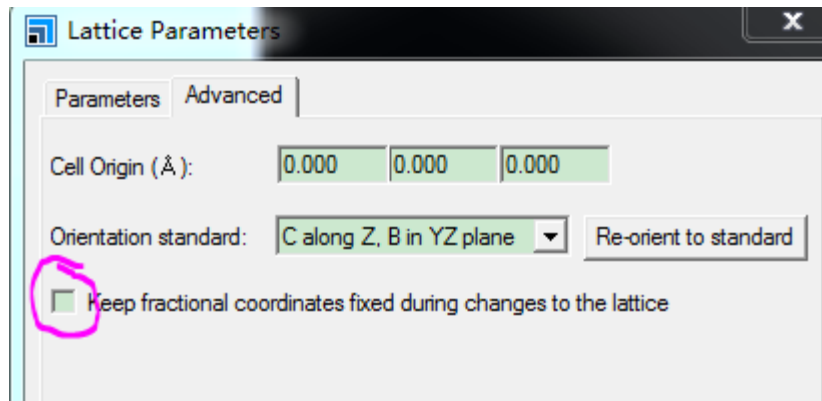
建立纳米管结构



根据需要扩展
纳米管长度

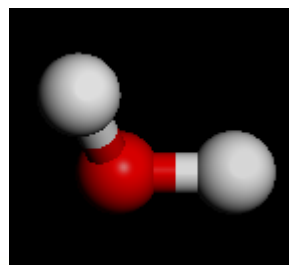


扩展碳纳米管外围空间

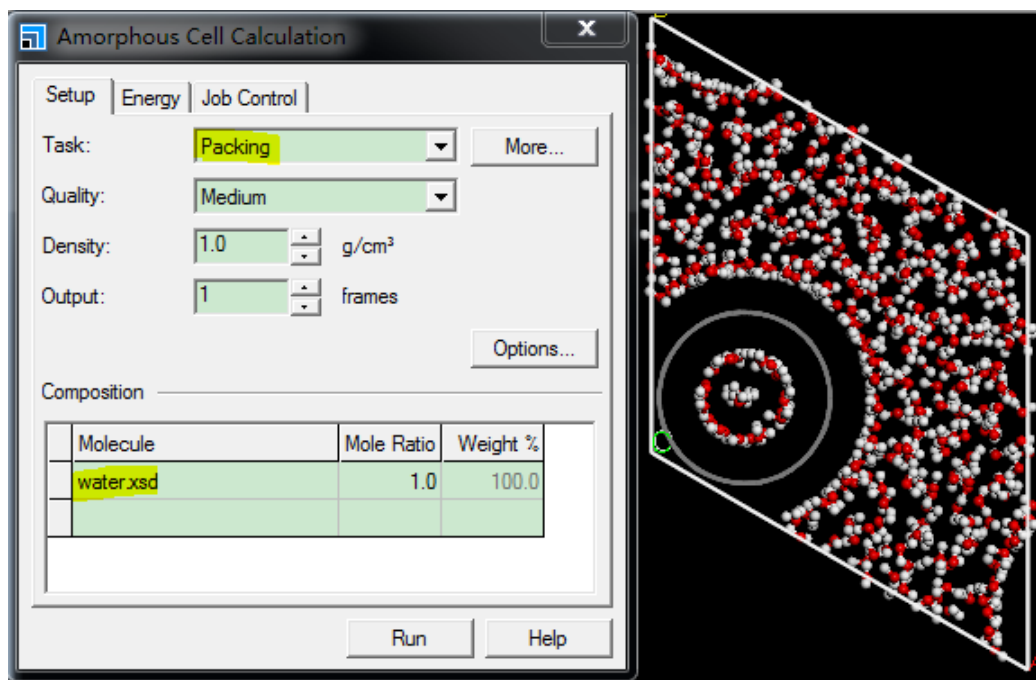


把得到的结构复制一份，以备用

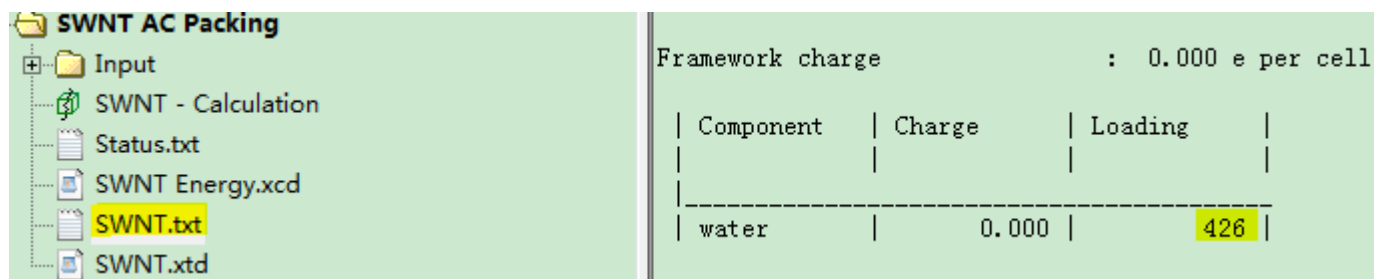
画一个水分子



向纳米管中填充水，设置密度为1g/cc



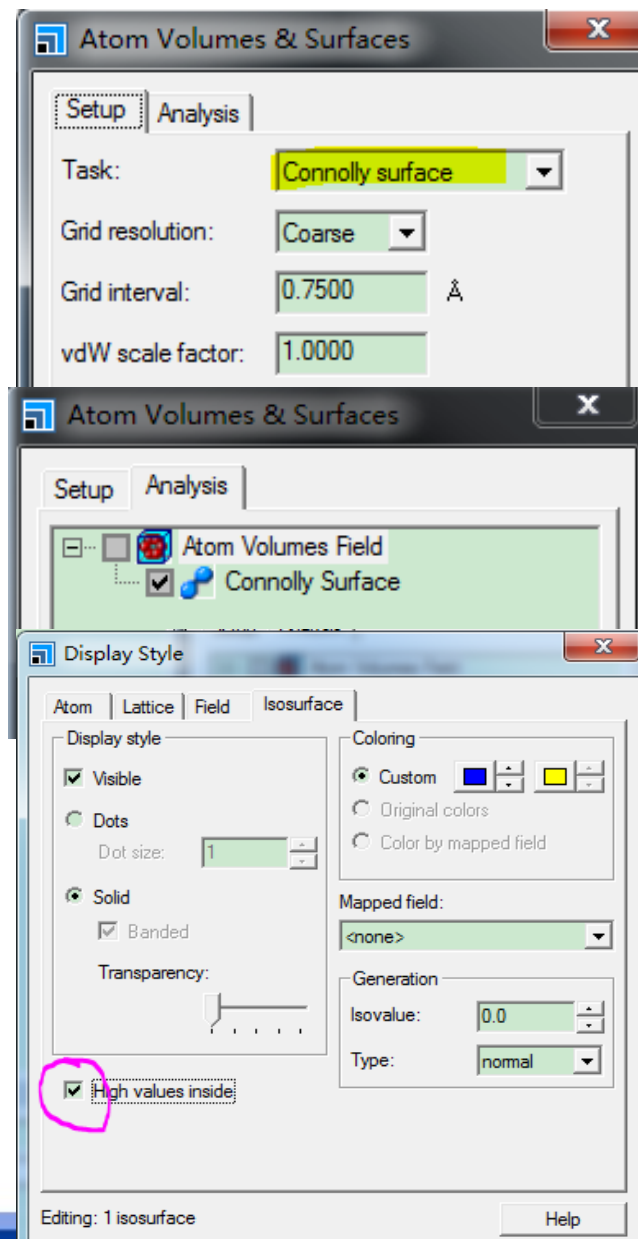
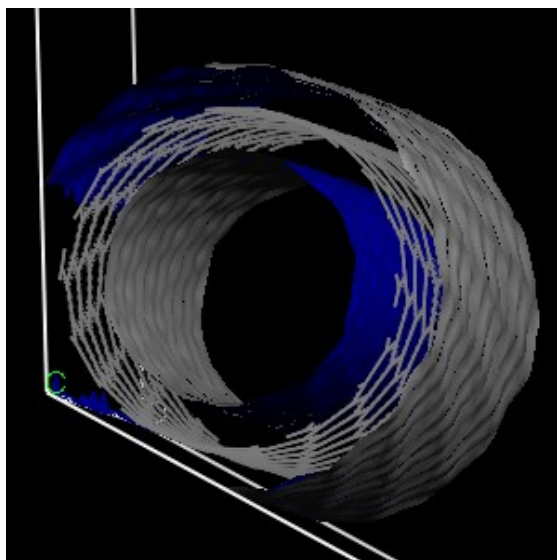
密度指的是填充在一有效的体积中的分子的密度



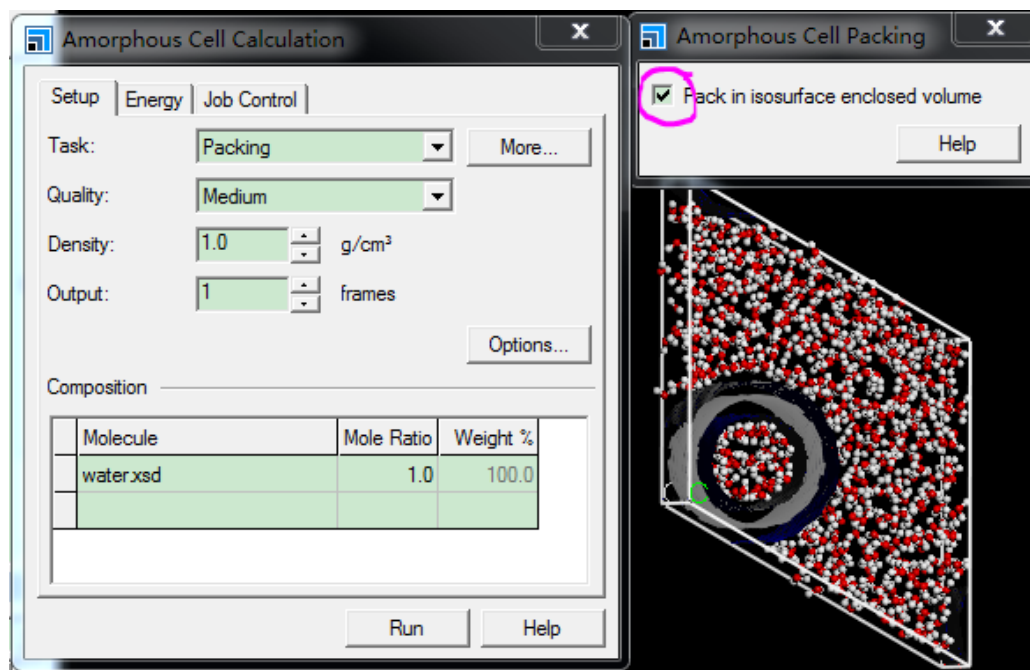
查看运算结果文件，观察到有426个水分子

向含有等值面的碳纳米管填充

用tool/Atom volumes and Surfaces 工具
创建一个Connolly surface



调用AC packing向定义的等值面填充水



The left panel shows a file explorer with a folder named 'SWNT_water AC Packing'. Inside, there is an 'Input' folder, a file 'SWNT_water - Calculation', a file 'SWNT_water.txt' (highlighted in yellow), a file 'Status.txt', and a file 'SWNT_water_Energy.xsd'.

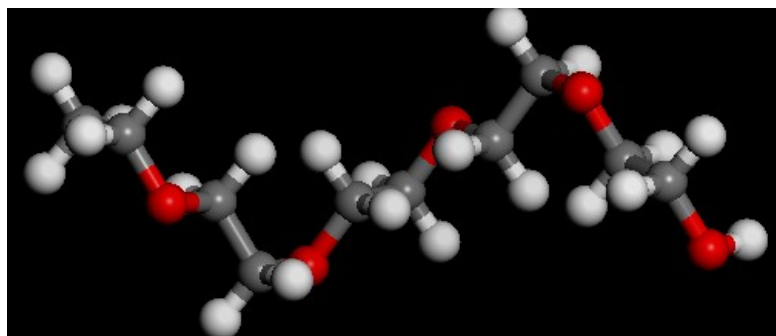
The right panel displays a table with the following data:

Framework charge : 0.000 e per cell			
Component	Charge	Loading	
water	0.000	558	

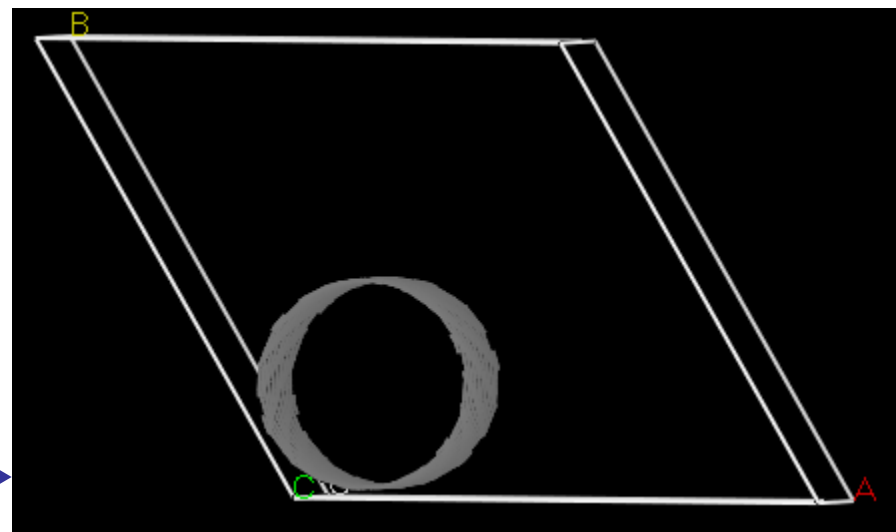
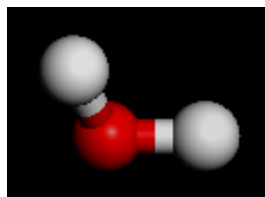
查看运算结果文件，观察到有558个水分子

2、向碳纳米管内外填充不同的物质

采用Homopolymer building 工具从Oxides library 中创建一个聚合度为5的聚环氧乙烯，重命名为peo5.xsd

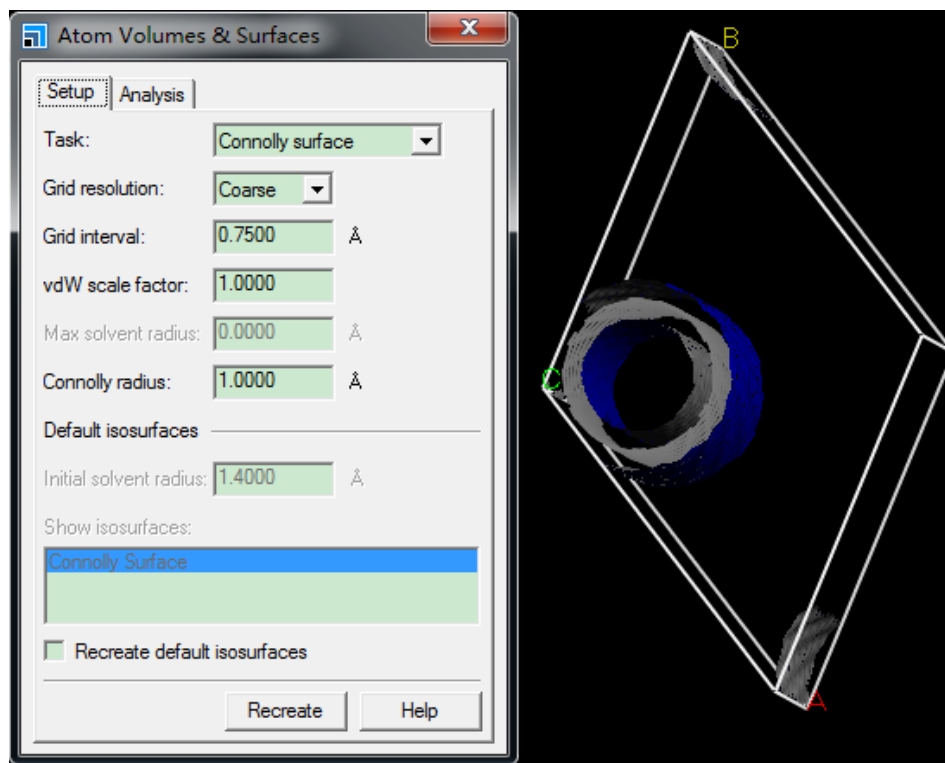


建立水的结构

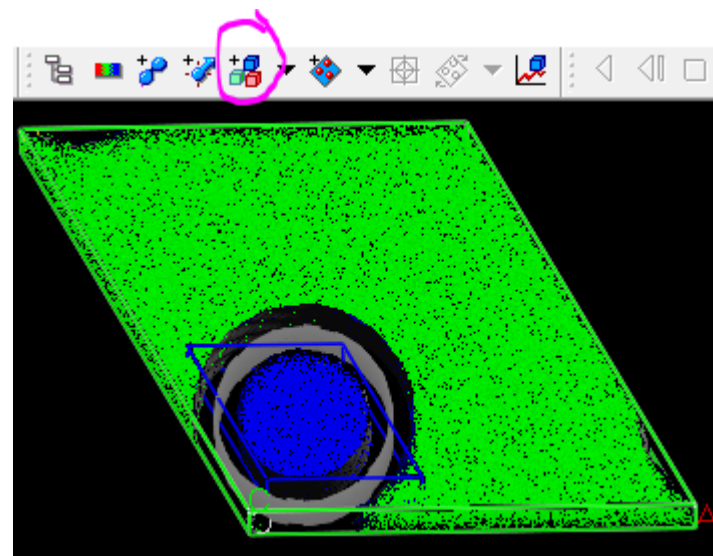


采用fields 和isosurfaces 来表明希望填充的位置

采用fields 和isosurfaces 来表明希望填充的位置

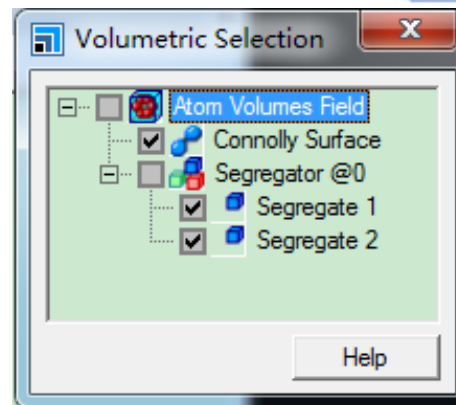


创建等值面

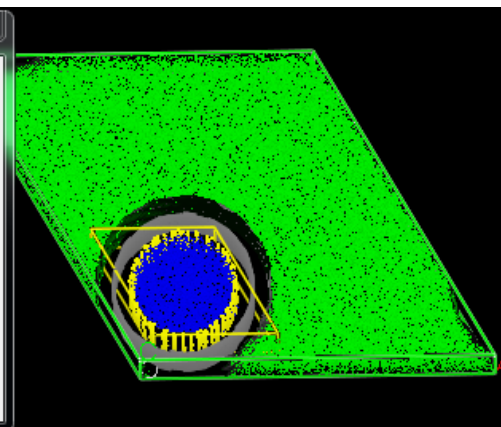
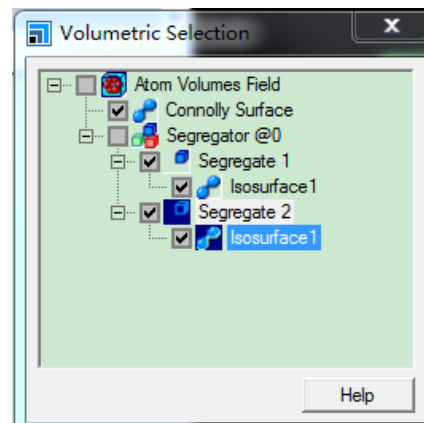
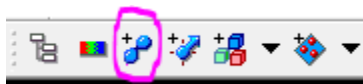


在创建的等值面的基础上创建
分割区域，以蓝绿显示

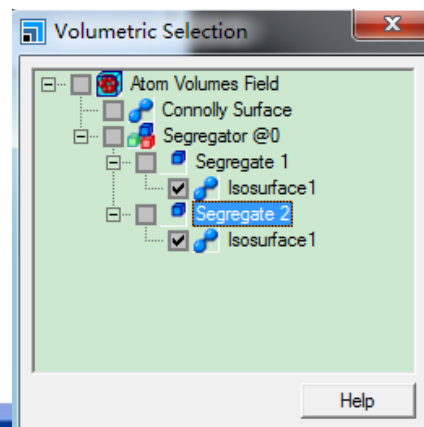
点击Volumetric Selection 按钮



选择两个Segregates。点击
Create Isosurfaces 按钮



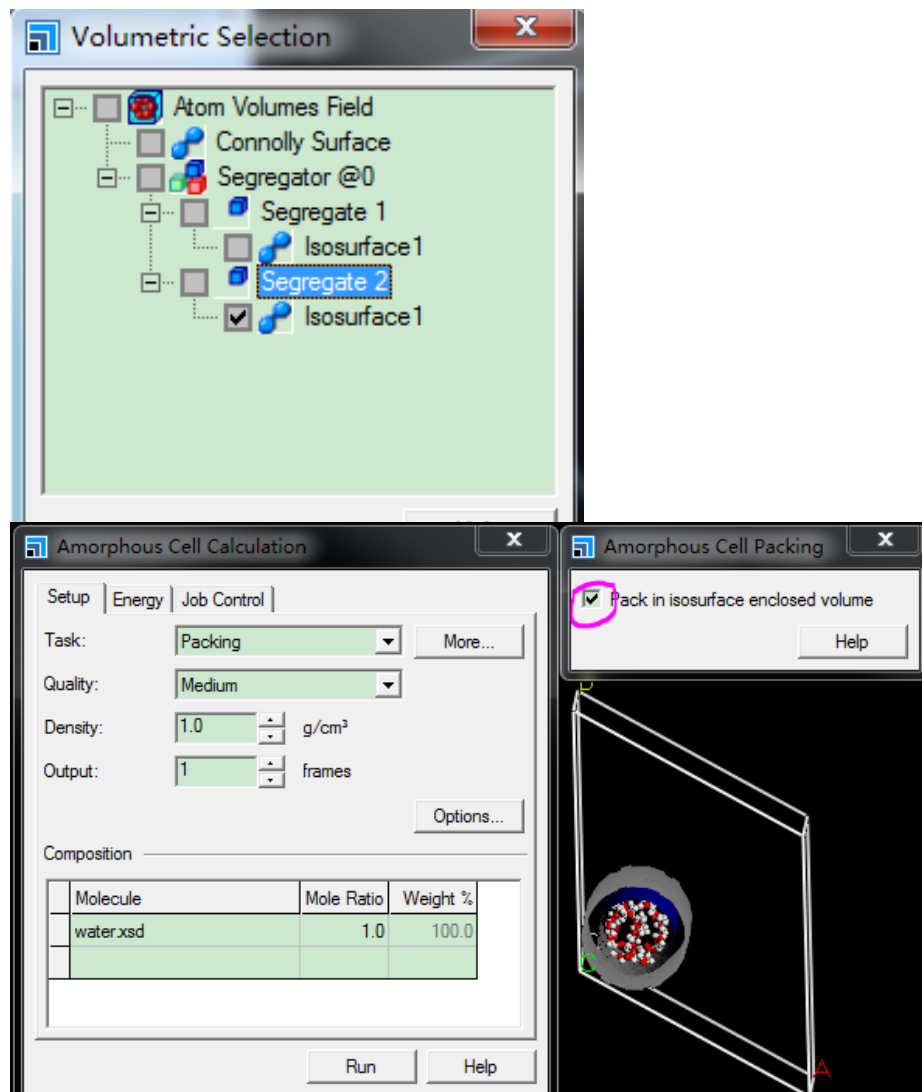
Volumetric Selection 对话框
中，取消选择Connolly Surface,
Segregate1 和Segregate 2。



在两个等值面封闭的体积内采用两次packing 计算进行填充

确保目标文件，这里为SWNT_polymerFe.xsd 为活性文件，在Volumetric Selection 对话框中，取消选择Segregate 1 -> Isosurface1

调用AC填充功能向选中的等值面填充物质

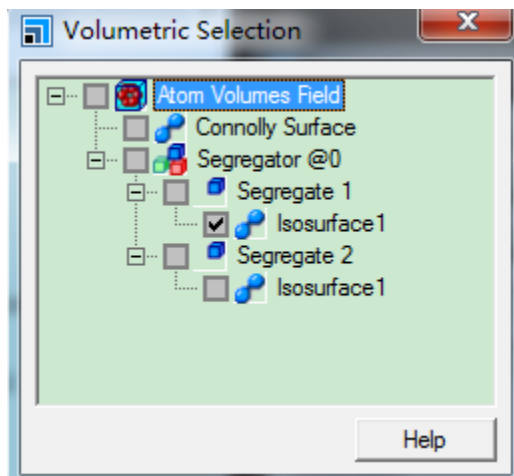


激活已经填充一种物质的
结果文件中的.xtd文件。

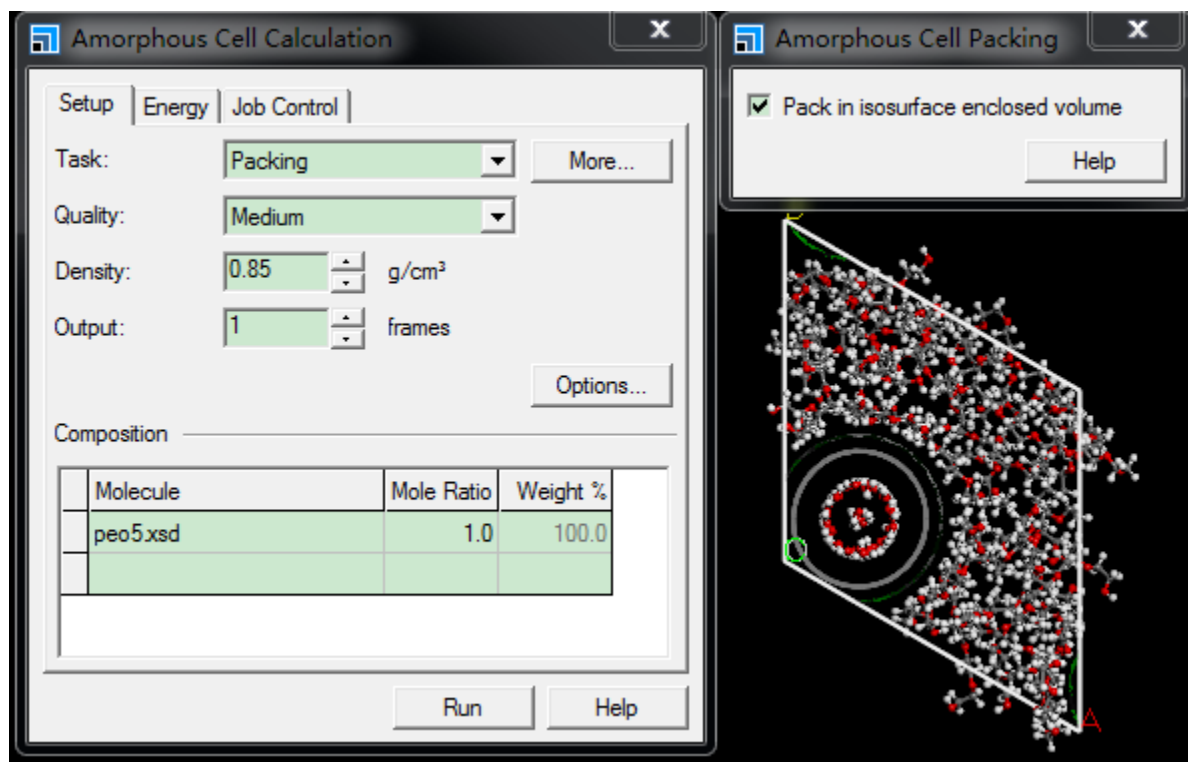
点击Volumetric Selection 按钮



Volumetric Selection 对话框
中进行如下设置



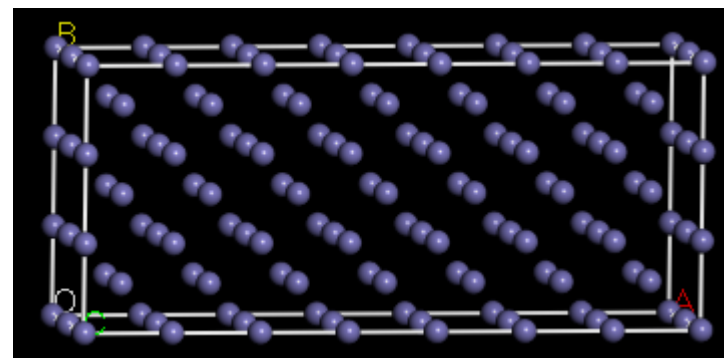
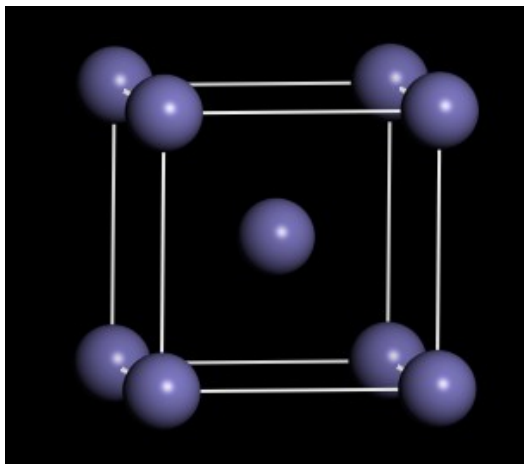
调用AC填充功能向选中的等值面填充物质



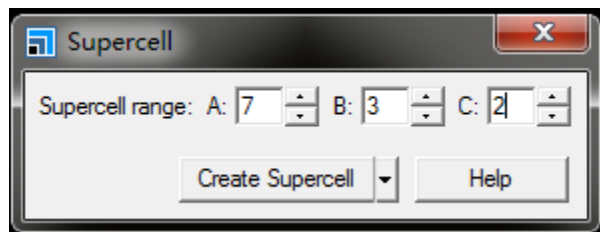
3、层状模型的搭建-金属-聚合物-金属模型

1、金属表面搭建

从structure-metals-pure-metals文件中输入Fe.xsd结构:

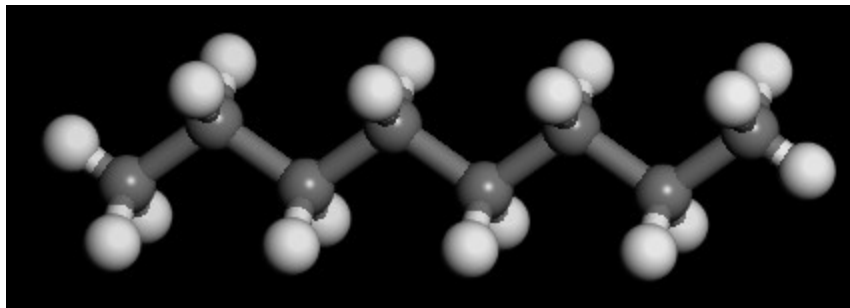
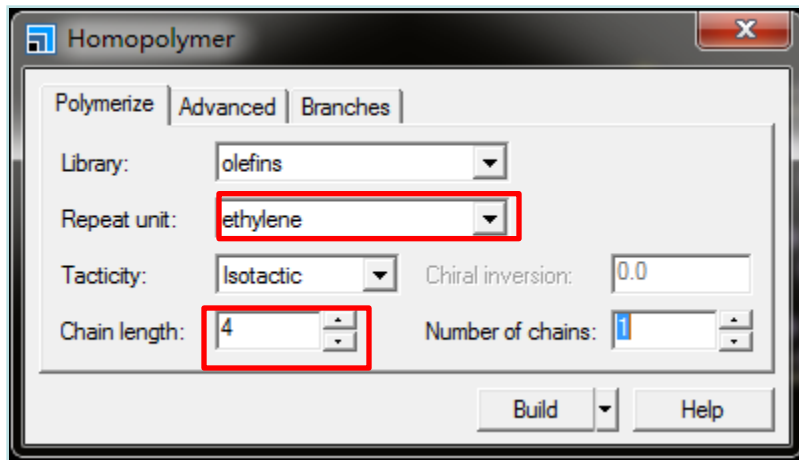


使用Build-symmetry-supercell构建supercell结构:

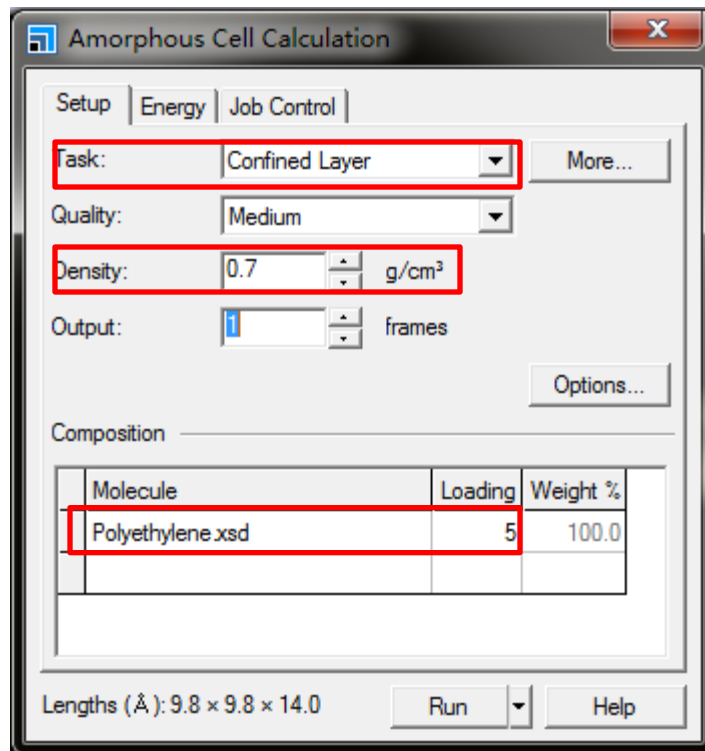


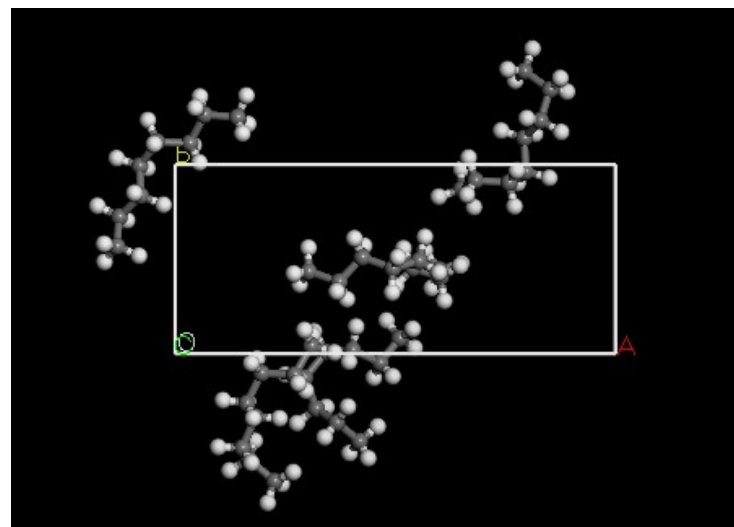
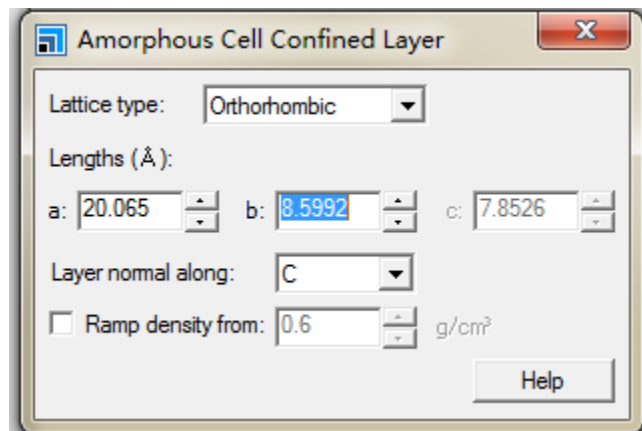
2、创建蜡状聚合物

使用Build-polymer-Homopolymer构建蜡状聚合物：

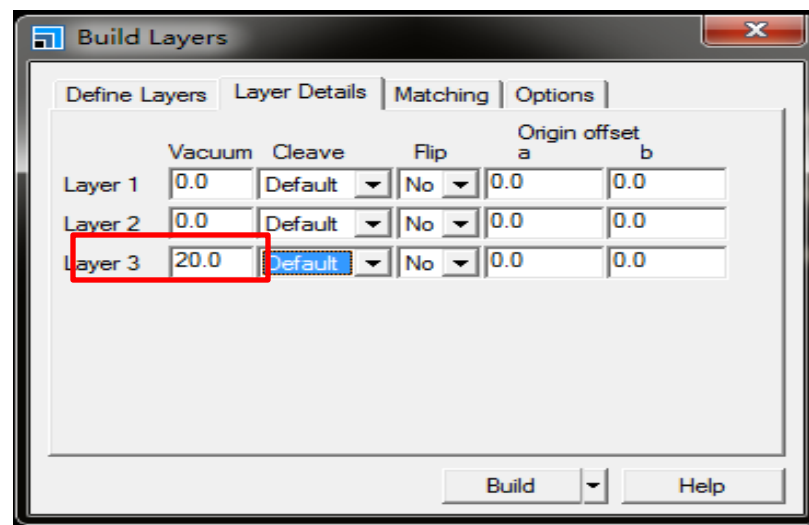
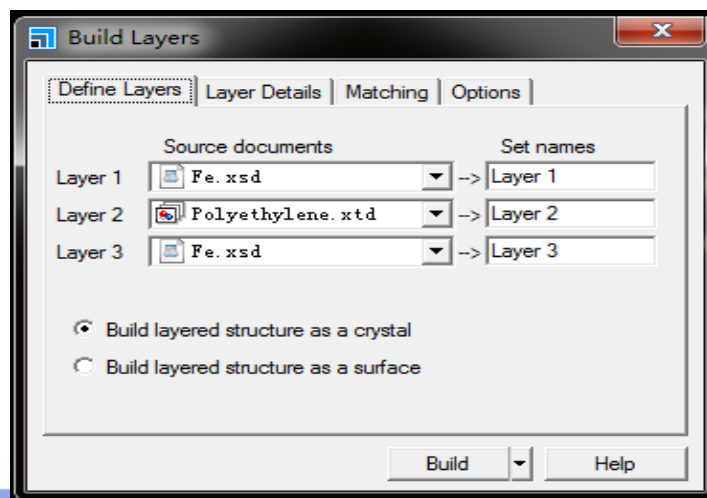


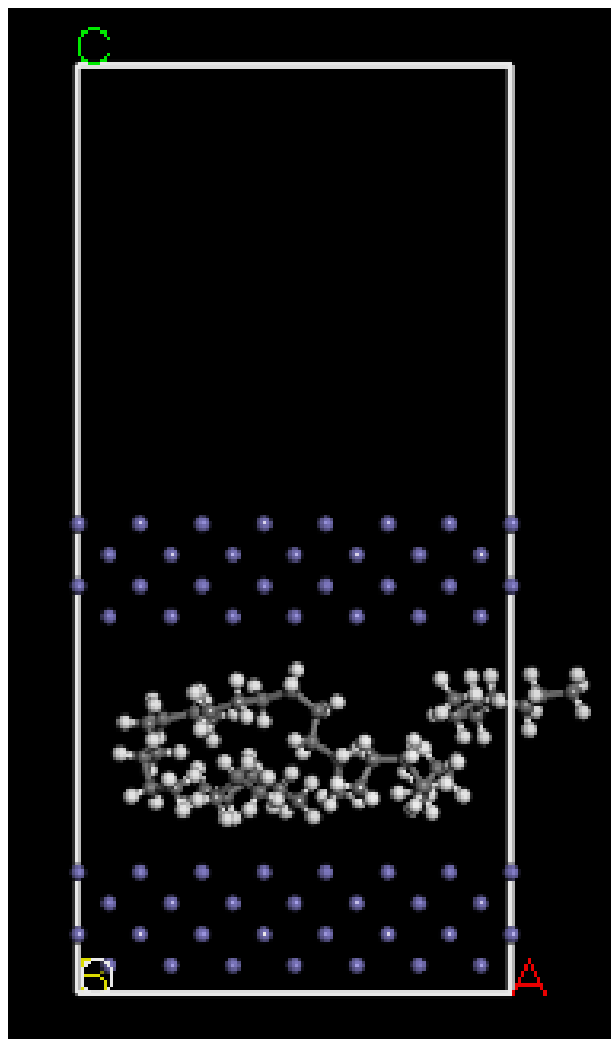
使用Amorphous cell模块构建聚乙烯无定型结构：





3、建层状结构





我们的技术支持帐号

ms@neotrident.com