



Materials Studio 培训

Blends模块的使用方法及应用

Blends : 评估混合物的混溶性

Blends用于预测溶剂和聚合物体系的可混合性，并且能够很好的给出这些体系在制作过程中的稳定性。

可用于研究：

- 相图
- 相互作用参数 χ
- 混合能
- 混合自由能
- 能量分布
- 根据能量排序结合构型

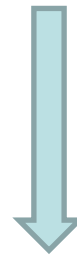
Flory-Huggins model

$$\frac{\Delta G}{RT} = \frac{\phi_b}{n_b} \ln \phi_b + \frac{\phi_s}{n_s} \ln \phi_s + \chi \phi_b \phi_s$$

其中， ΔG 为混合自由能， ϕ_i 为各组分的体积分数， n_i 为聚合度， χ 为相互作用参数， T 为绝对温度， R 为气体常数

前两项始终为负值，表示结合熵，使得体系趋于混合；后一项表示自由作用的自由能，使得体系趋于分散。两者之间的竞争产生不同的相图。

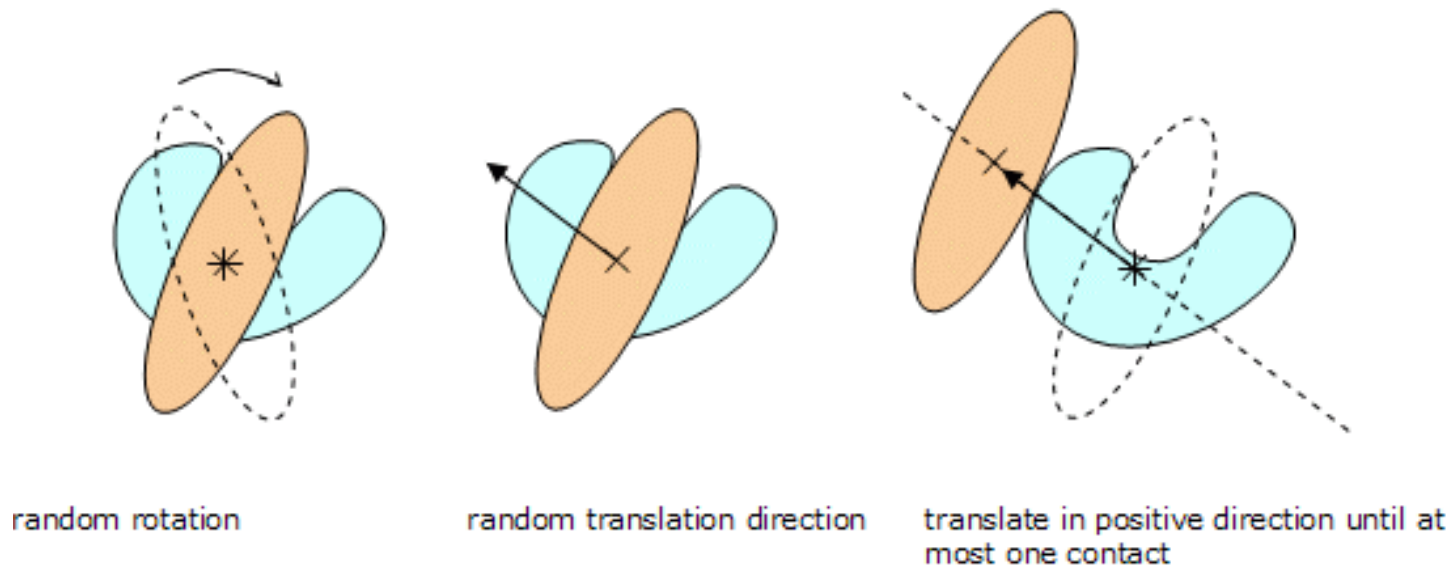
$$E_{mix} = \frac{1}{2} (Z_{bs} \langle E_{bs} \rangle_T + Z_{sb} \langle E_{sb} \rangle_T + Z_{bb} \langle E_{bb} \rangle_T + Z_{ss} \langle E_{ss} \rangle_T)$$



计算结合能与配位数后，可直接得到相互作用参数

$$\chi = \frac{E_{mix}}{RT}$$

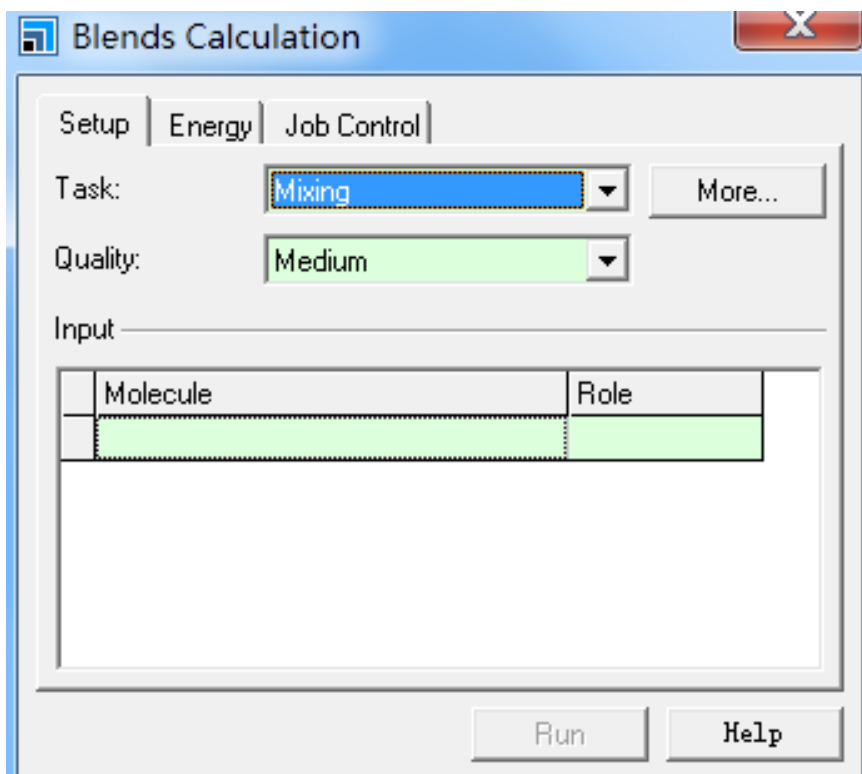
排除体积约束方法



计算从两个具有凝聚态性质的分子结构开始：

- 1、从单独的种子分子开始；
- 2、填充进一个分子，使其质心与种子分子重合；
- 3、随机转动填充分子的方向；
- 4、指出随机旋转方向；
- 5、填充分子沿着指定方向移动，直到它的范德华表面不再与种子分子重叠；在图中两个分子式接触的，如果原子被标为非接触，那么放弃这个构象，重复3-5步；
- 6、计算结果构象的相互作用能，存储到直方图（不同组分的结合能的能量分布图）；
- 7、重复3-6步。

Blends : Setup



- **计算任务**

混合、结合能、配位数

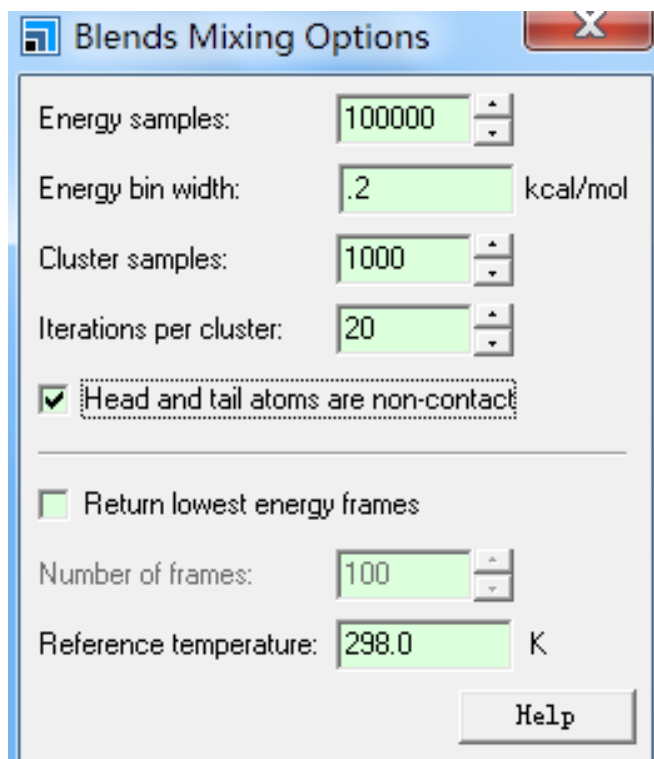
- **计算精度**

Coarse、Medium、Fine、
Ultra-fine

- **作为输入的分子结构**

分子、角色

Blends : Setup



能量取样数目

能量选择宽度

计算配位数团簇的取样数目

构建团簇的迭代次数

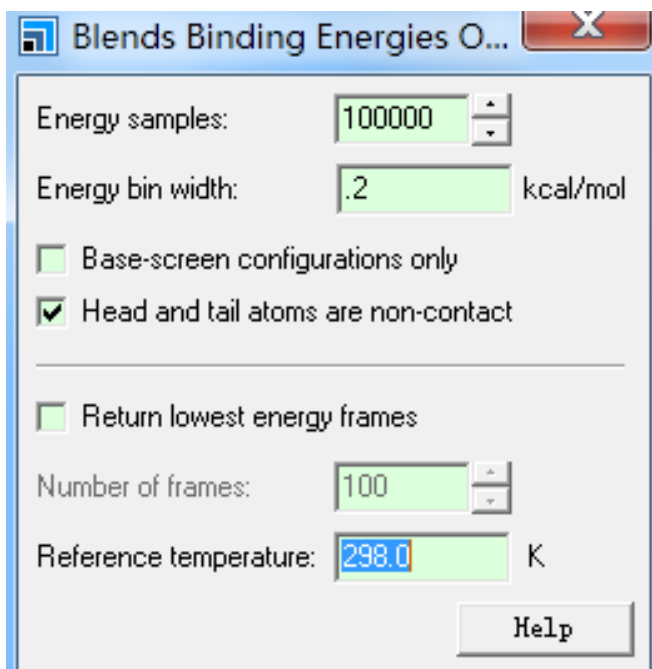
头尾原子是否相连

输出最低能量结构

输出最低能量结构个数

参考温度

Blends : Setup



能量取样数目

能量选择宽度

只考虑Base-screen配置

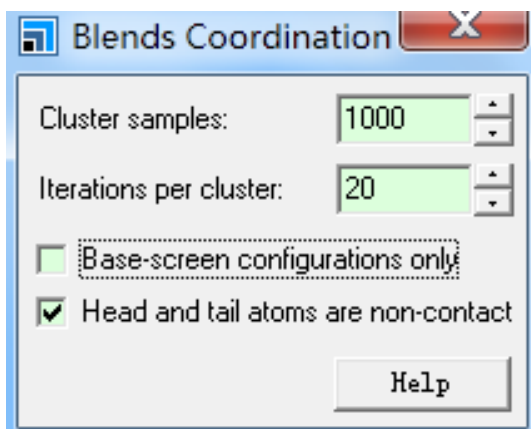
头尾原子是否相连

返回最低能量结构

返回结构数目

参考温度

Blends : Setup



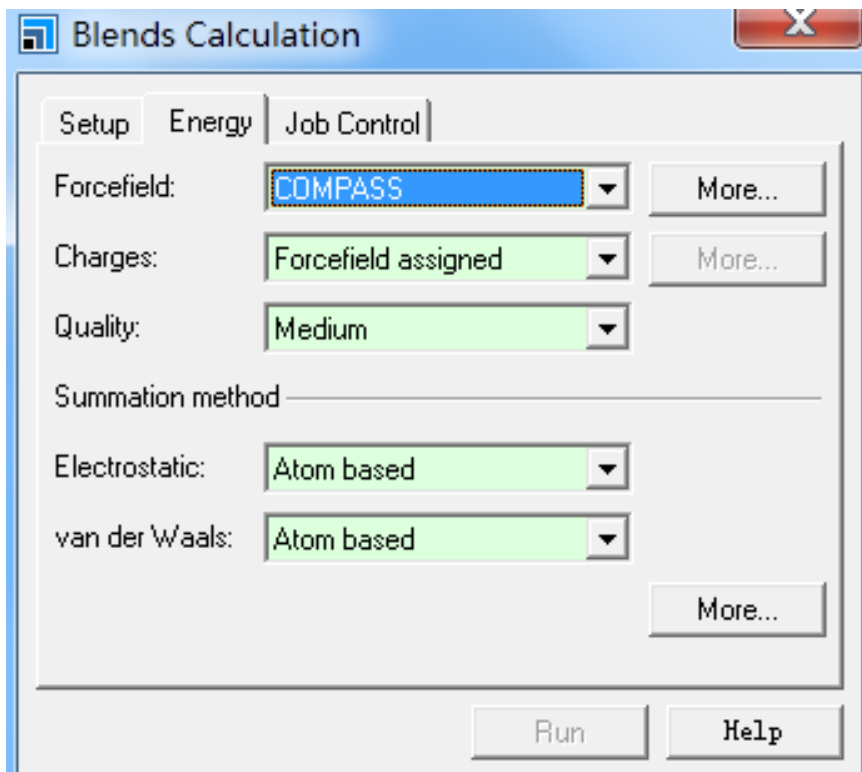
团簇取样数目

迭代次数

只考虑Base-screen配置

头尾原子是否相连

Blends : Energy



- 力场**

Dreiding、Universal、cvff、
cvff_nocross_nomorse、pvff、
pvff30、Browse...

- 电荷**

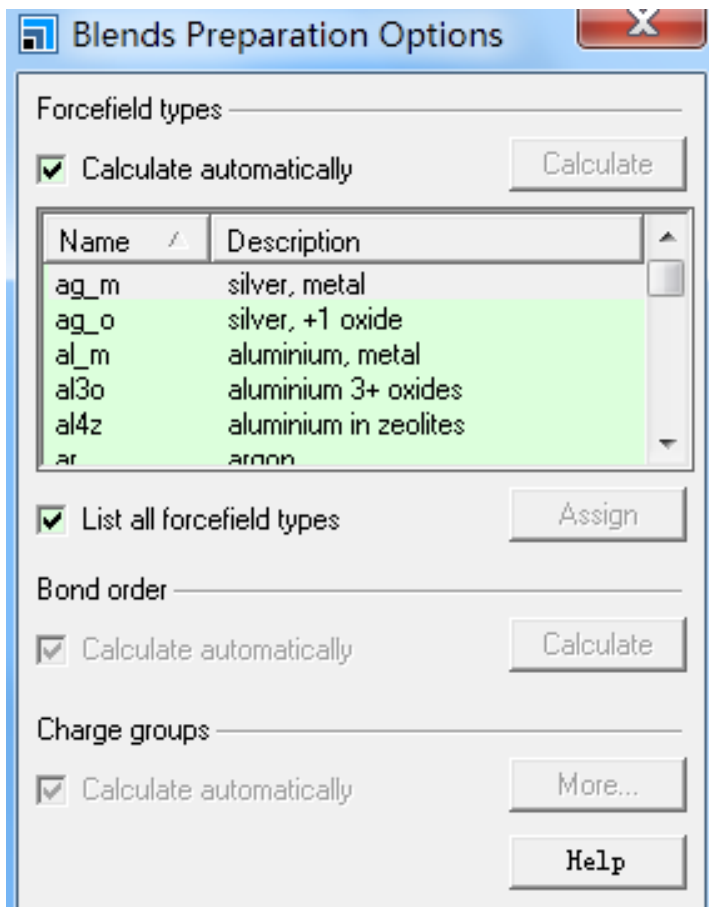
Use current、Charge using Qeq、
Charge using Gasteiger、
Forcefield assigned

- 能量计算精度**

- 静电、范德华力加和方法**

静电相互作用：Atom based、
Group based、Ewald、Ewald &
Group
范德华相互作用：Atom based、
Group based

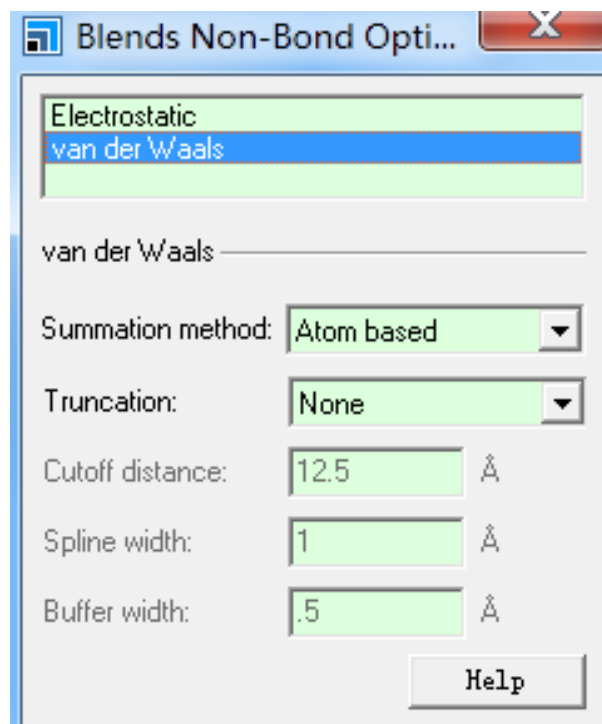
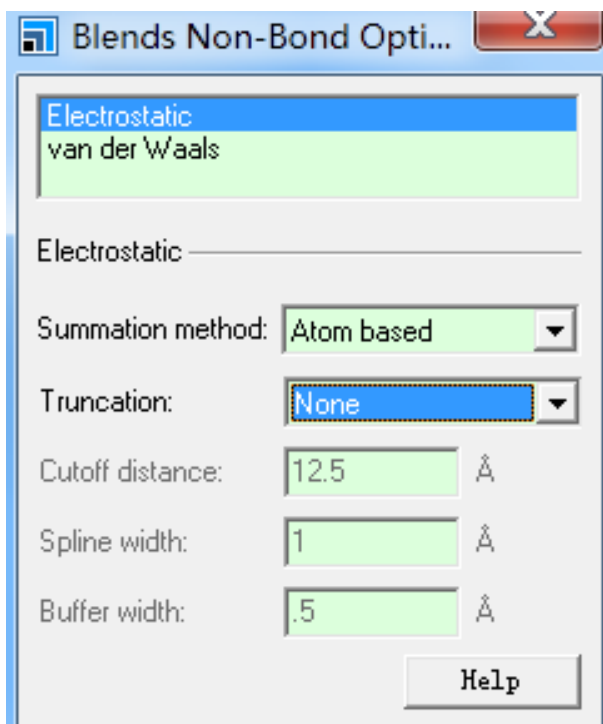
Blends : Energy



计算力场类型、键级、电荷组

查看所有的力场类型

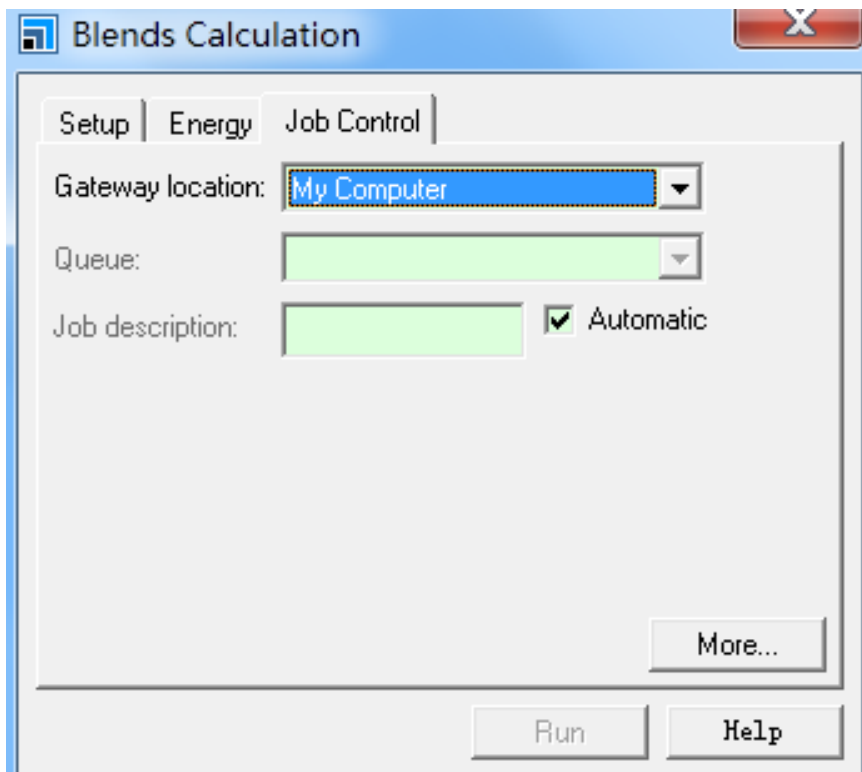
Blends : Energy



详细设置静电、范德华力的参数

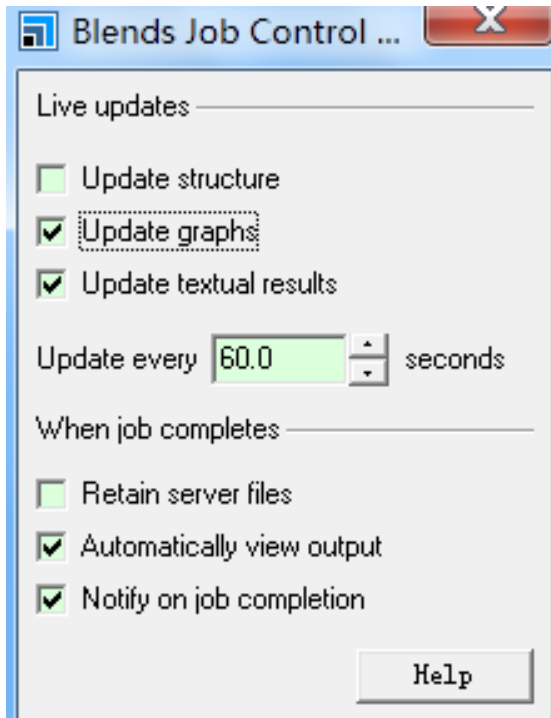
求和方法、精度、截断形式、截断半径等

Blends : Job Control



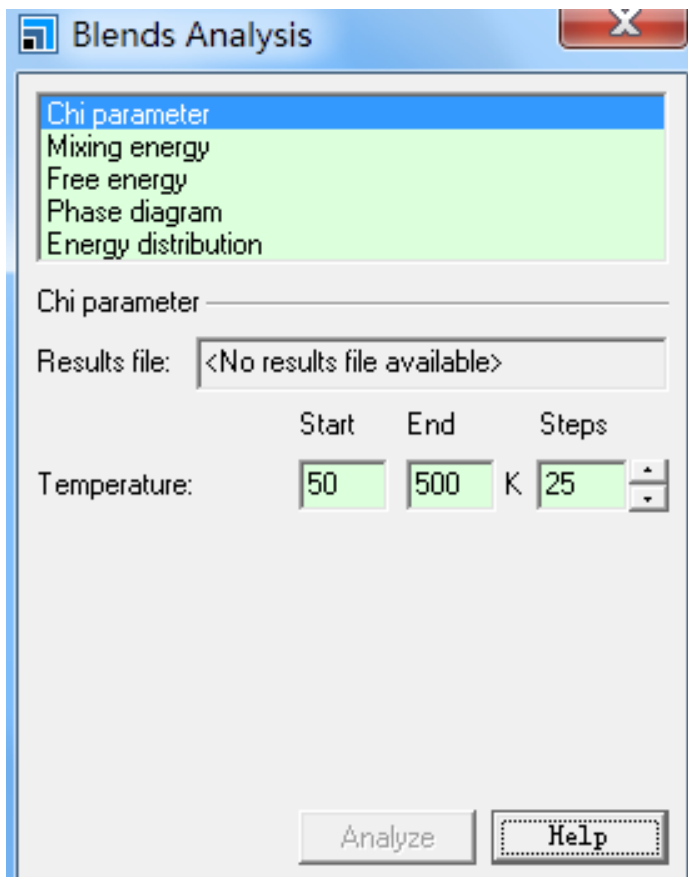
- Gateway选择（服务器）
- 队列选择（若有）
- 任务描述

Blends : Job Control



- 实时更新：
 - 更新结构
 - 更新图表
 - 更新文本结果
- 更新间隔
- 任务完成
 - 在服务器上保留文件
 - 自动打开结果
 - 完成时通知

Blends : Analysis



Chi参数

混合能

自由能

相图

能量分布

案例：使用Blends筛选分子相互作用

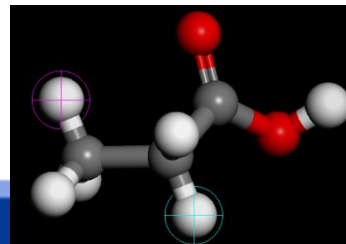
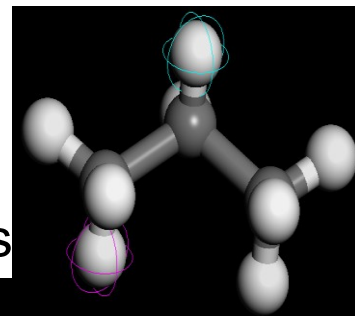
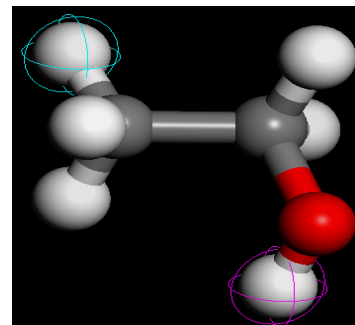
目的：您将导入的结构单体：聚（氧乙烯），聚丙烯，和聚（丙烯酸），使用此模块检查**聚氧乙烯与聚丙烯和聚丙烯酸的相容性**。

预测 Flory-Huggins χ 参数与温度的关系以及两个混合物的相图。

使用 study table检查50个最低能量对 from each run and overlay these to look at low energy absorption sites.

步骤一：

- 1 创建新的project，命名为polyoxyethylene（聚氧乙烯）
- 2 引入结构Structures/repeat-units/oxides/oxyethylene.msi
Structures/repeat-units/olefins/propylene.msi
Structures/repeat-units/acrylates/acrylic_acid.msi



步骤二：准备输入结构

Blends模块的计算可以帮助筛选聚合物-聚合物，聚合物-溶剂，溶剂-溶剂间的相互作用

1 在将重复单体放入**blends**计算前，需对单体结构优化，用**Forcite plus**进行。

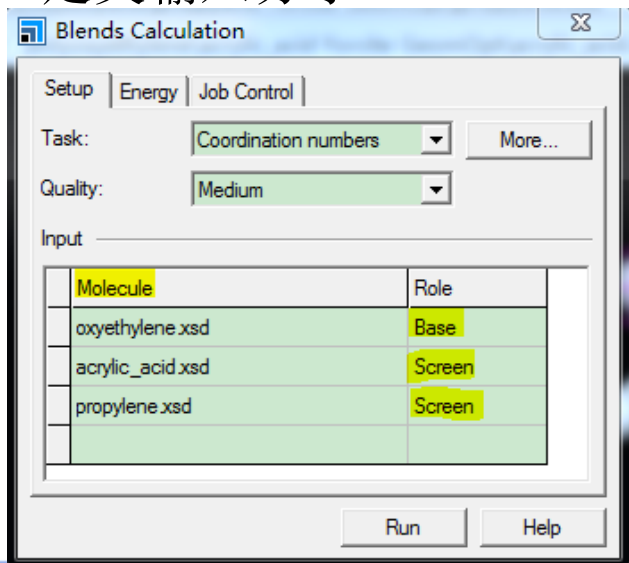
对三个分别进行如下参数的结构优化：**Forcite**的参数设置为

Setup任务为**eometry Optimization**.

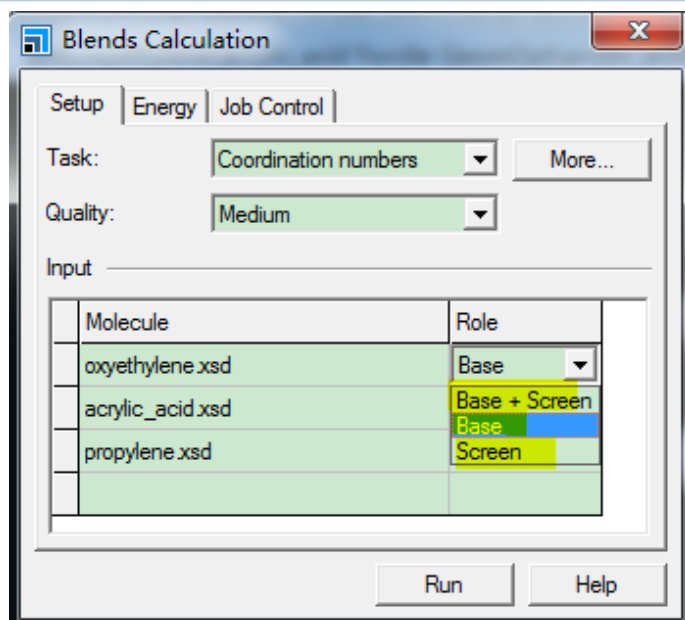
Energy 中设置**Dreiding**力场，**Charges**设置为**charge using QEq**

步骤三：设置**Blends**参数并进行计算

1 定义输入分子



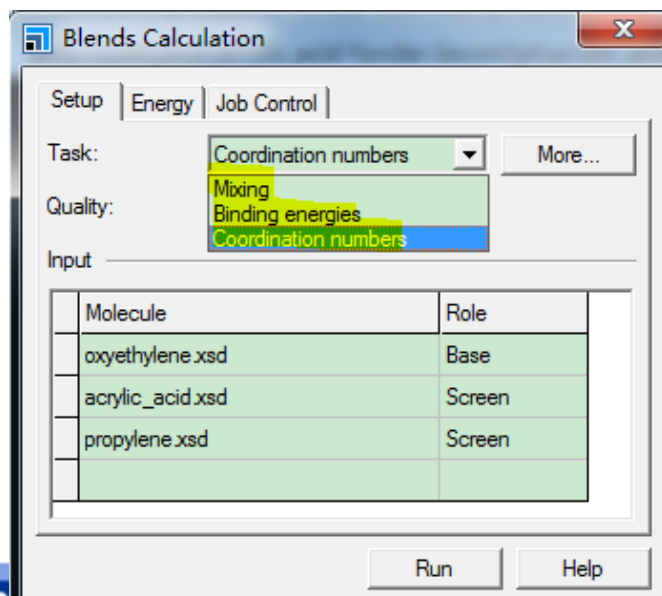
注意输入分子的顺序，第二个和第三个输入分子**propylene.xsd** 和 **acrylic_acid.xsd** 被自动非配为**Screen**的角色。任何具有**screen**角色的分子 will be screened against molecules with a base role. 本例中，会得到**oxyethylene-propylene** and **oxyethylene-acrylic acid**混合物的相互作用能。这是一个一对多的筛选计算案例。



本例中设置oxyethylene为base

附加说明：Role选项的下拉菜单有三项 Base+Screen, Base, 和Screen. 如果需要计算聚合物的所有可能组合的相互作用，例如 poly(oxyethylene)-poly(oxyethylene), poly(oxyethylene)-polypropylene, poly(oxyethylene)-poly(acrylic acid), polypropylene-polypropylene, polypropylene-poly(acrylic acid), and poly(acrylic acid)-poly(acrylic acid), 则需要将每一个输入的分子的role定义为 Base+Screen.

2 设置参数



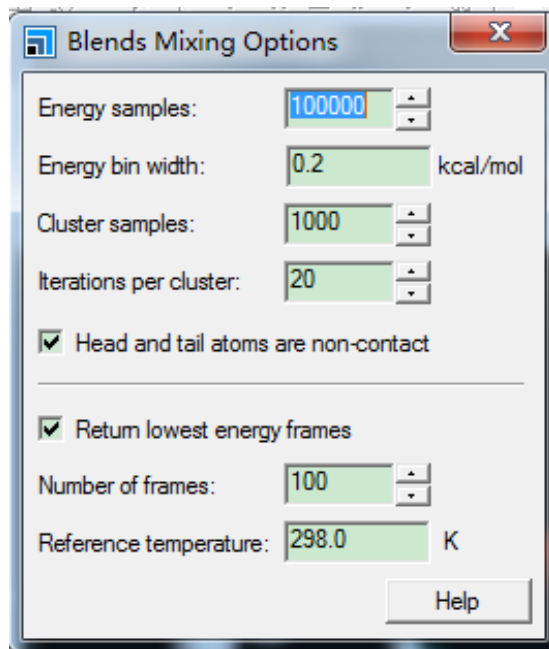
选择task为Mixing，并打开more选项

附加说明：

Mixing – 意味着计算binding energy 和 coordination number 。预测 mixing energy, interaction energy, 和chi parameter values.

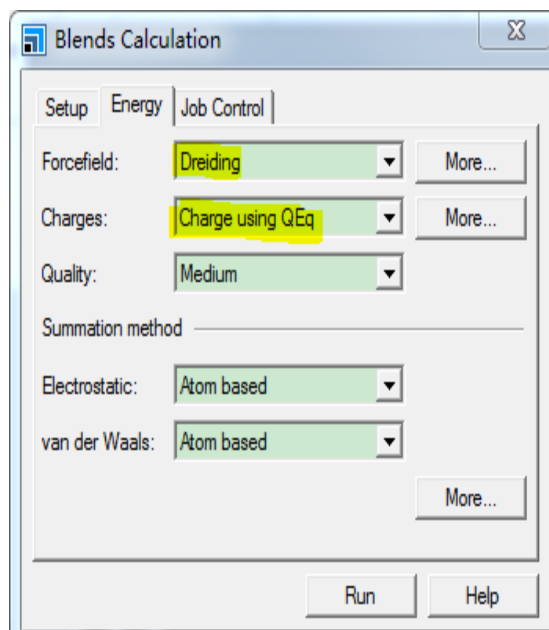
Binding energies – 只计算binding energies only. 这将给出快速的screen on interaction energy

Coordination numbers – 计算成对分子的配位数 molecules.

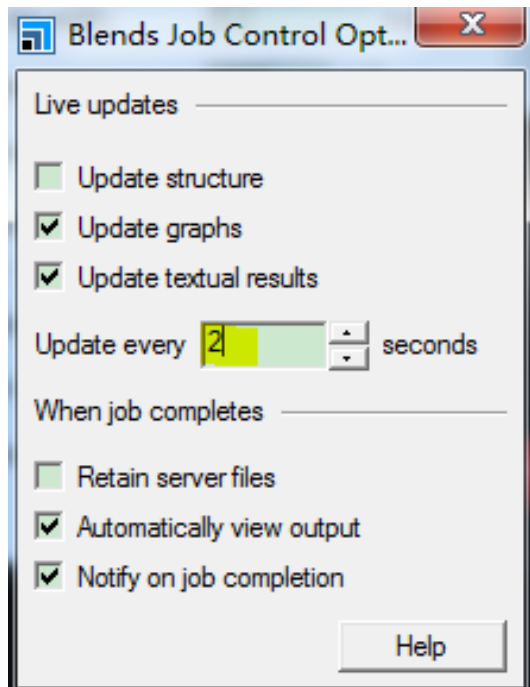


勾选Head and tail atoms are non-contact

勾选Return lowest energy frames, 并将number of frames改为50

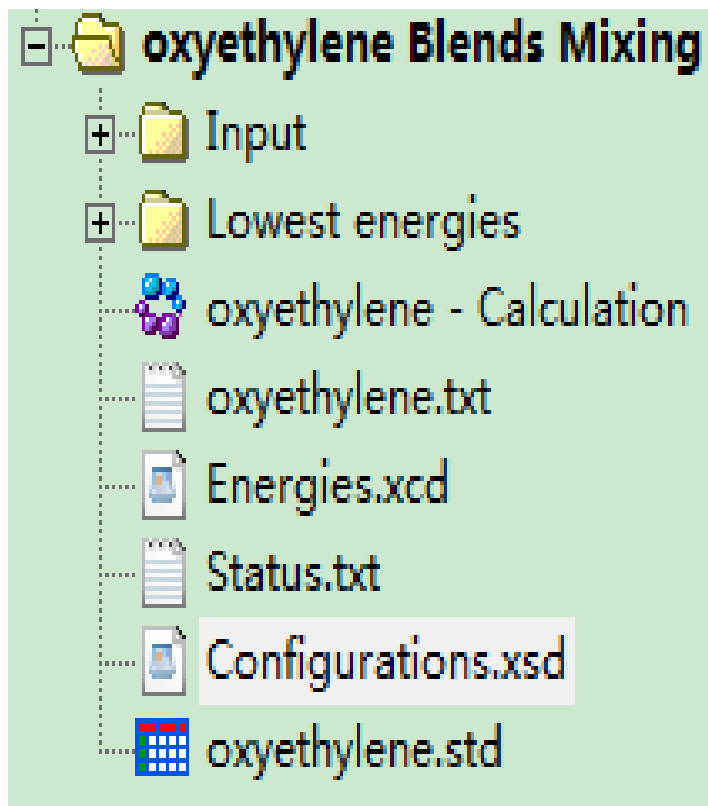


在**Energy**面板上
Forcefield设为**Dreiding**
Charges设为 **Charge using QEq**.









在任务控制的**more**选项中，将**update every** 改为**2**秒，而后点击**run**，注意到**blend**是不能并行的。

计算结果文件及意义



- **Input**: 包含输入结构的文件夹
- **Lowest energies**: 包含3D原子轨迹的文件夹
包含了每一个base和screen组合的最低能量构型，对于每一个这样的组合，Blends返回三个轨迹文件，包括the base-base, base-screen, and screen-screen pair的构型。任何一对如果和已有的重复，则被忽略。
- **oxyethylene - Calculation**: 包含本次计算设置的面板可打开
- **oxyethylene.txt**: 任务进行的信息和任何的警告
- **Configurations.xsd**: 目前正在取样的3D结构。这一文件是实时更新的
- **Energies.xcd**: 目前正在取样的能量的图表文件，实时更新
- **Status.txt**: 实时更新的计算状态
- **oxyethylene.std**: 包含计算结果的 study table

步骤四：分析计算结果

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
Base	Screen	Energies	Chi (298 K)	Emix (298 K)	Ebb avg (298 K)	Ebs avg (298 K)	Ess avg (298 K)	Ebb min	Ebs min
 oxyethylene	 acrylic_acid	 oxyethylene_acrylic_acid	0.06519308	0.03860653	-0.83120253	-0.87360864	-0.92551323	-2.16503518	-2.34433377
 oxyethylene	 propylene	 oxyethylene_propylene	1.06195229	0.62887491	-0.83120253	-0.49925707	-0.47099746	-2.16503518	-1.24735944

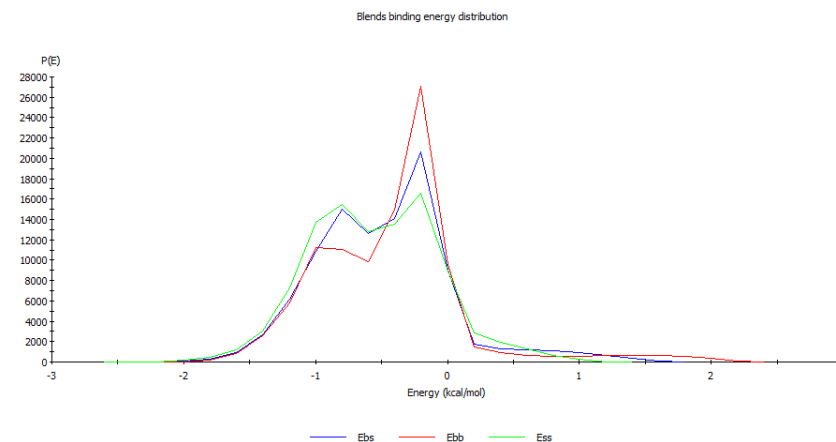
K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U
Ess min	Ebb avg	Ebs avg	Ess avg	Ebb max	Ebs max	Ess max	Zbb	Zbs	Zsb	Zss
-2.49541909	-0.42868553	-0.48930878	-0.55667342	2.26601456	1.61163505	1.11316129	4.04800000	4.04100000	4.67700000	4.67700000
-1.07309934	-0.42868553	-0.44699681	-0.43907638	2.26601456	-0.15681042	-0.18970002	4.04800000	4.08400000	4.40600000	4.52600000

C列包含了图表文件，如右图所示，包含了base-base, base-screen, and screen-screen的相互作用能。

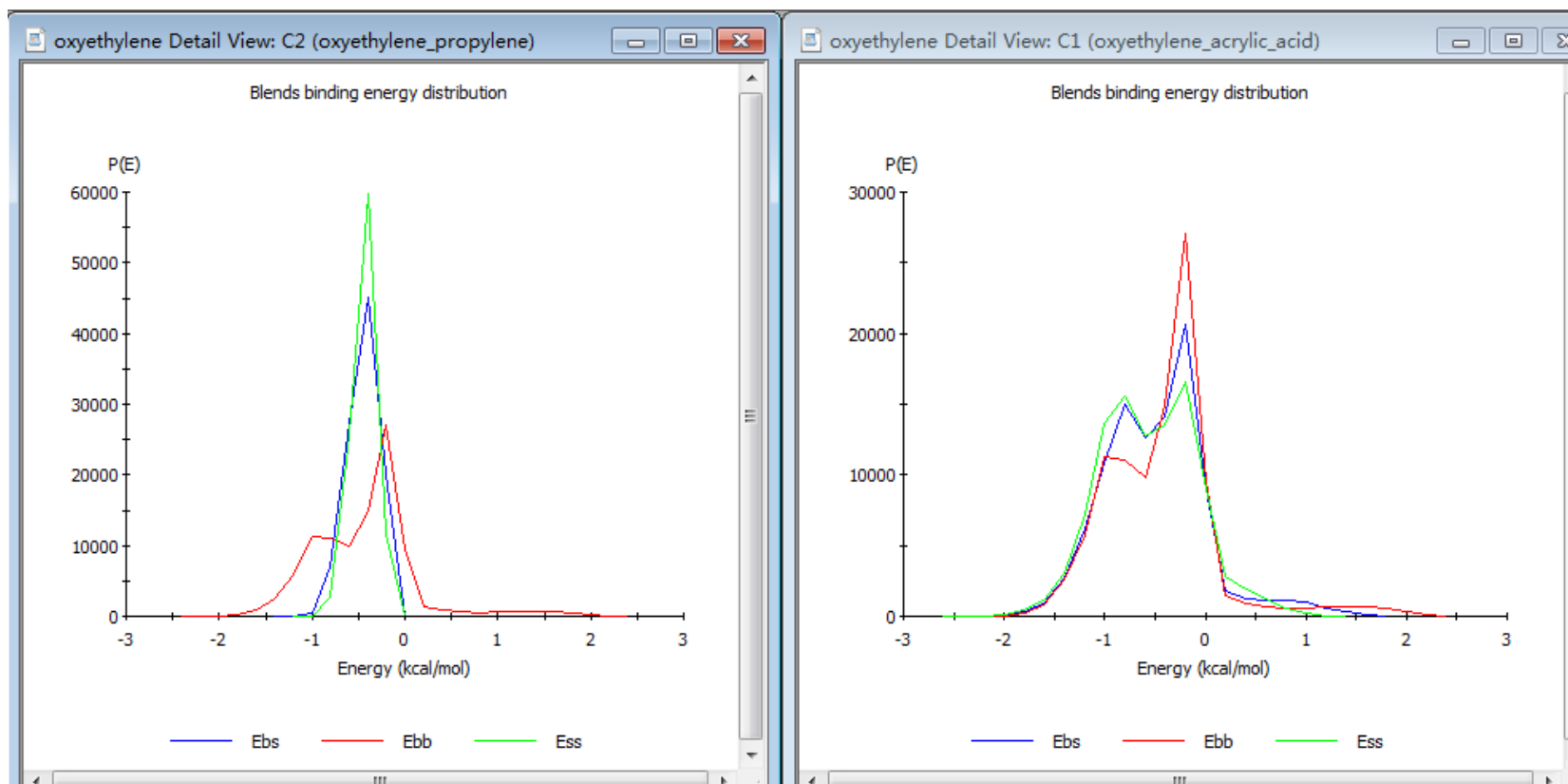
D列为预测的chi参数

E列为混合能

F-Q包含了 breakdown of the interactions energies 给出了平均值，最小值，最大值. R-U 包含了每一个base和screen的配位数



在study table中打开C1和C2列，查看混溶性，如下图所示：



如果binding energies for the base-base (E_{bb}), base-screen (E_{bs}), and screen-screen (E_{ss})具有非常相似的分布，则意味着两个结构是相容的。以上的两个图，可以得出 poly(oxyethylene) 与 poly(acrylic acid)混溶（右图），而与polypropylene不混溶（左图）

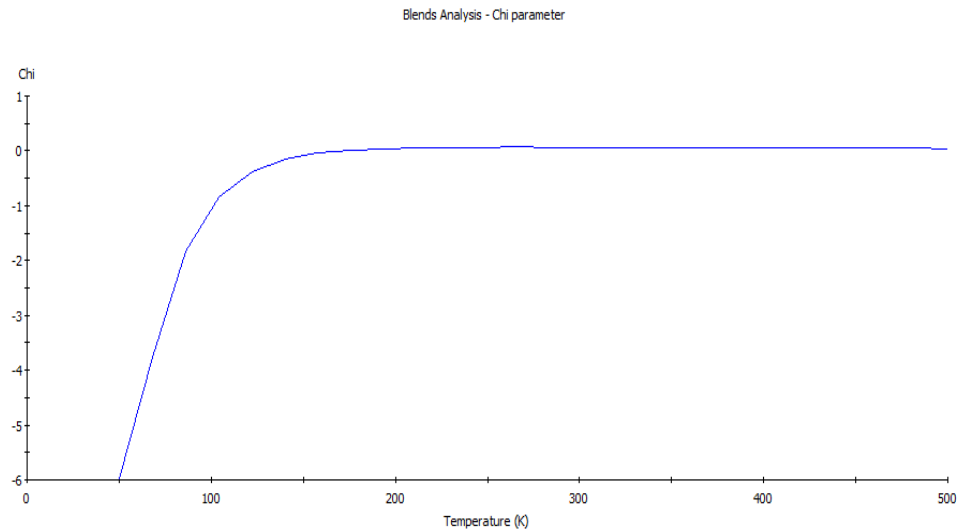
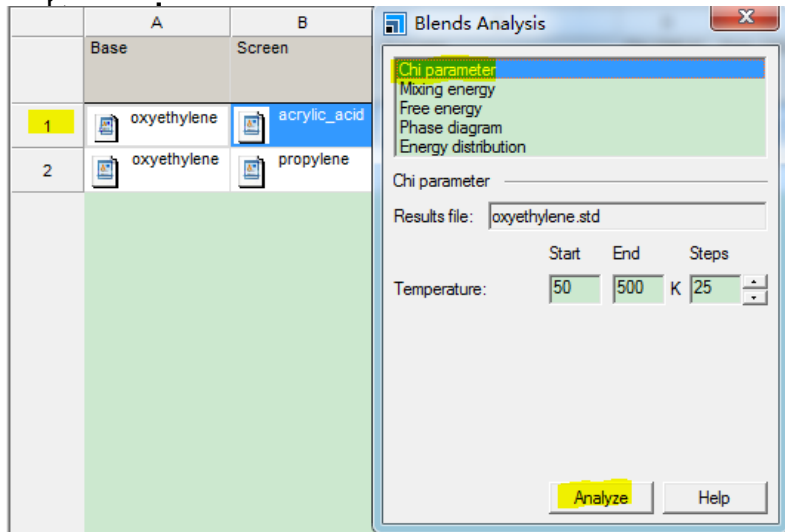
在**study table**中打开**D**和**E**列，查看混溶性，如下表所示：

D	E
Chi (298 K)	Emix (298 K)
1.06195229	0.03860653
	0.62887491

chi参数的值接近于0意味着相容性， E_{mix} 的值接近于0也意味着相容性。越大的 χ 和 E_{mix} 则意味着更不容易混溶. 这些值更加印证了从能量分布曲线上得到的结论 poly(oxyethylene)将与poly(acrylic acid)混溶，而不与polypropylene混溶

Blends支持使用分析工具去分析study table中的结果

在study table中选中第一行，选择 Modules | Blends | Analysis，选择 Chi parameter点



也可同时选两行，进行分析

