


Materials Studio中文培训资料

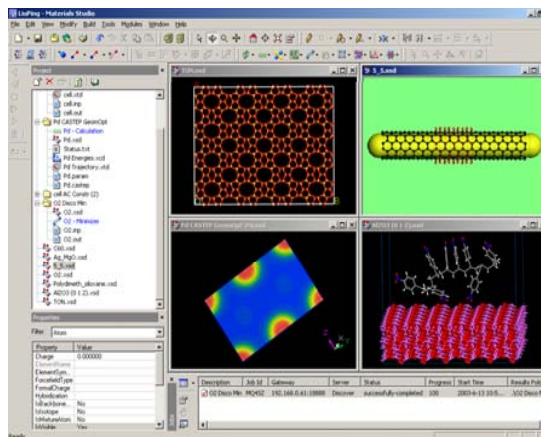


培训讲义

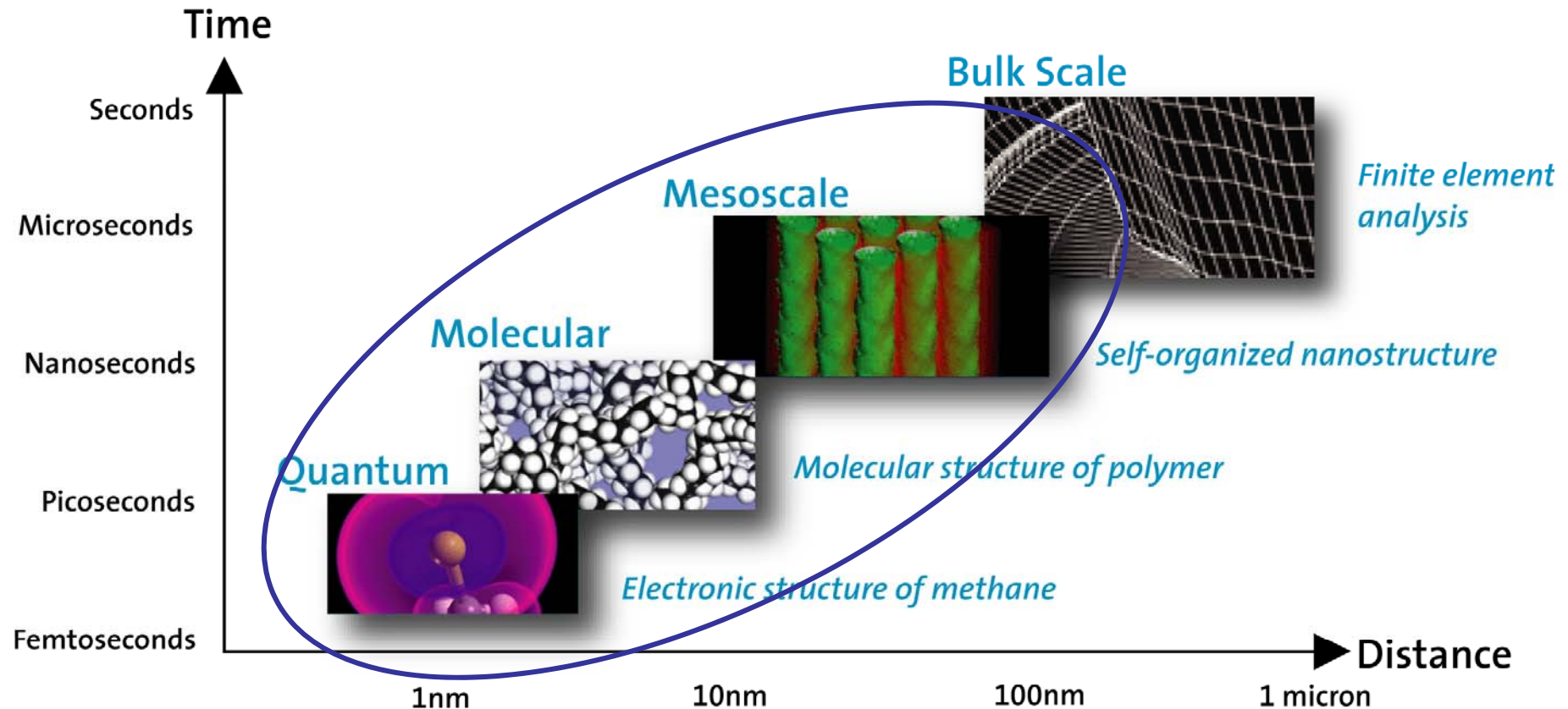
MS Forcite Plus

Materials Studio是整合的计算模拟平台

- [illegible]



Materials Studio可对不同时间和空间尺度的体系进行研究



Forcite Plus是先进的分子力学和分子动力学模拟程序

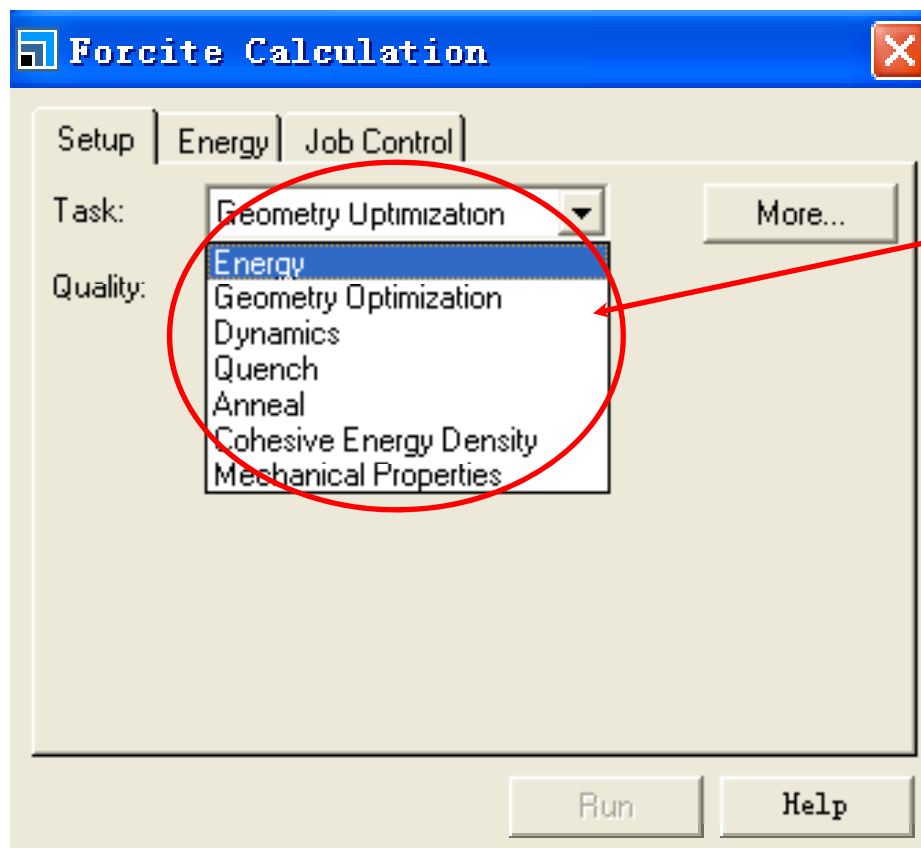
- 支持多种分子力场
- 对各种体系均适用
- 随着计算机软硬件的发展，近年来备受重视

其研究领域包括：

- 计算径向分布函数，取向关联函数和散射曲线
- 测量距离、角度和旋转半径的分布
- 给出特定成分的浓度曲线
- 绘制温度、压力、体积、应力以及单胞参数
- 给出分子力学和分子动力学模拟的势能及其组成项、动能和总能量值
- 材料力学性质研究
- 计算偶极相关函数
- 大量分子体系的内聚能密度和溶解性参数
- 对于估算自扩散系数的均方位移和速度相关函数
- 在学习表中观察并绘制轨迹数据

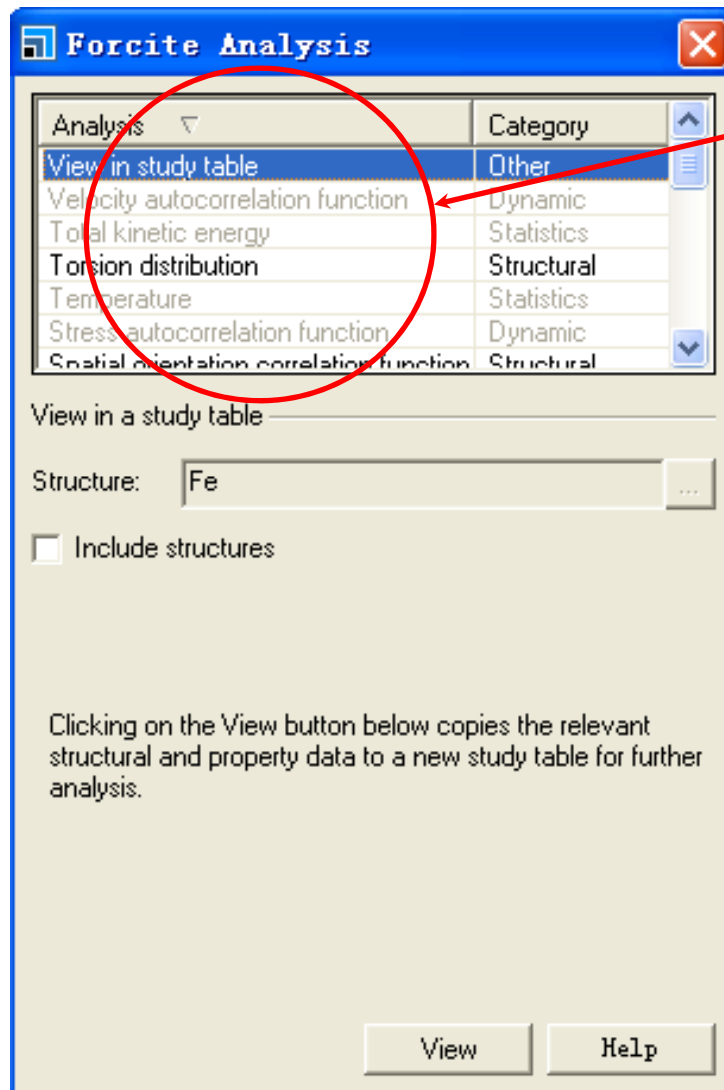
按任意性质排序，如，按能量排序，找到最低 能量构型

Forcite Plus: 基本任务



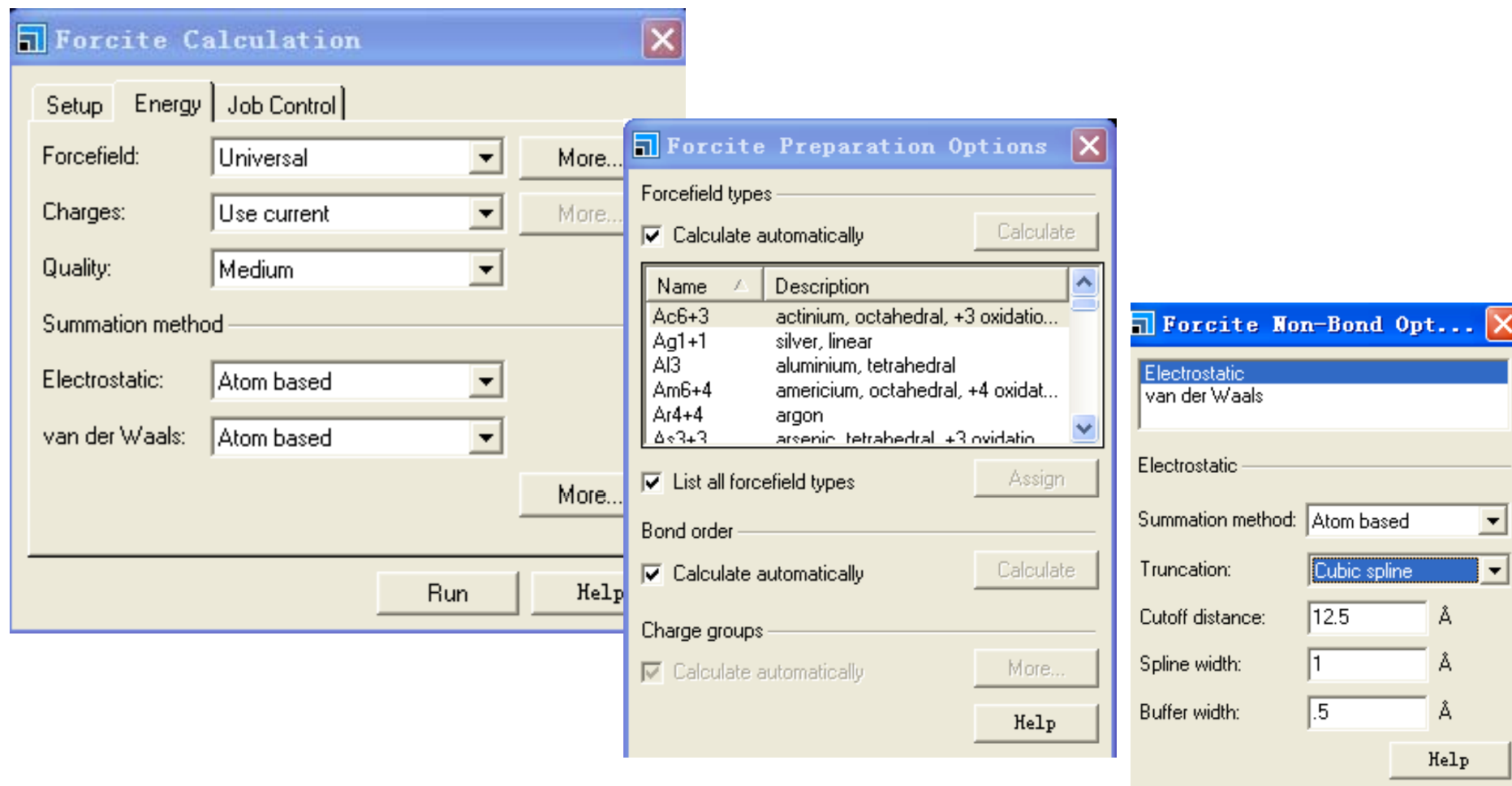
- 单点能计算
- 几何优化
- 动力学计算
- 淬火模拟
- 退火模拟
- 内聚能密度的计算
- 力学特性的计算

Forcite Plus : 各类性质分析



- 学习表中观察并绘制轨迹数据
- 速度相关函数
- 总动能
- 距离、角度和旋转半径分布
- 温度、压力
- 应力相关函数
- 取向关联函数
- 散射曲线
- 径向分布函数
- 势能项组成
- 均方位移
- 焓变
- 动态波动特征
- 偶极相关函数
- 密度、单胞参数
- 浓度分布曲线

Forcite Plus : 计算参数设置



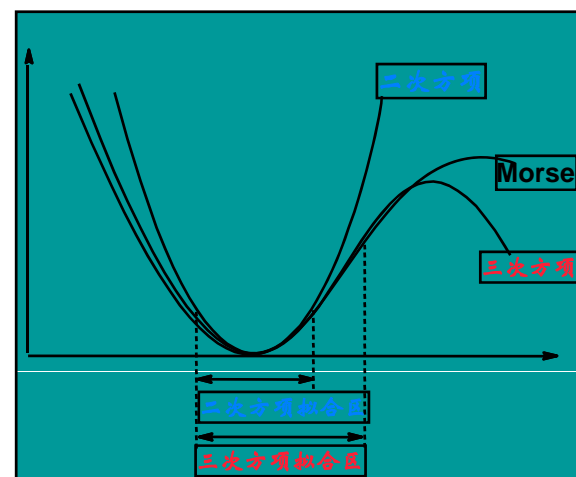
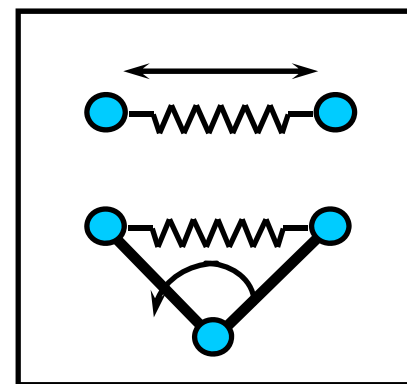
分子力学方法

- n 使用球和弹簧来描述原子之间所成的共价键
- n 包括非键**Van der Waals**作用和静电相互作用
- n 通过实验手段和/或**QM**计算来获取相关参数
- n 通常与动力学、结构优化或者蒙特卡罗方法联用
- n 非常适合于模拟分子与晶体间的相互作用

吸附能
吸附等温线
扩散速率
分离
沸石体系
IR 光谱
高分子性质
粘性
玻璃态结构

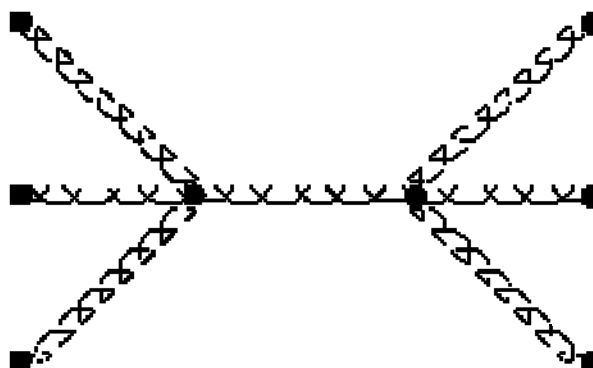
模块的概念——分子力学

$$\begin{aligned}
 V(r_1, r_2, \dots, r_N) &= V_r + V_\alpha + V_\theta + V_{nb} + V_q \\
 &= \sum_{bonds} \frac{1}{2} K_r [r - r_{eq}]^2 + \sum_{angle} \frac{1}{2} K_\alpha [\alpha - \alpha_{eq}]^2 \\
 &\quad + \sum_{dihedrals} K_\theta [1 + \cos(n\theta - \delta)] \\
 &\quad + \sum_{\substack{pairs(i,j) \\ i < j}} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right] \\
 &\quad + \sum_{\substack{pairs(i,j) \\ i < j}} \frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}}
 \end{aligned}$$



力场

- 分子可以用一系列带电点(原子)来描述，之间由弹簧连接(键)



- 对于该体系的数学描述，就是我们所说的力场
- 力场被用来计算分子的相对势能(相对于同样分子的其他构型)

力场表达式 – Part 1

势能

$$E_{\text{total}} = E_{\text{valence}} + E_{\text{crossterm}} + E_{\text{non-bond}}$$

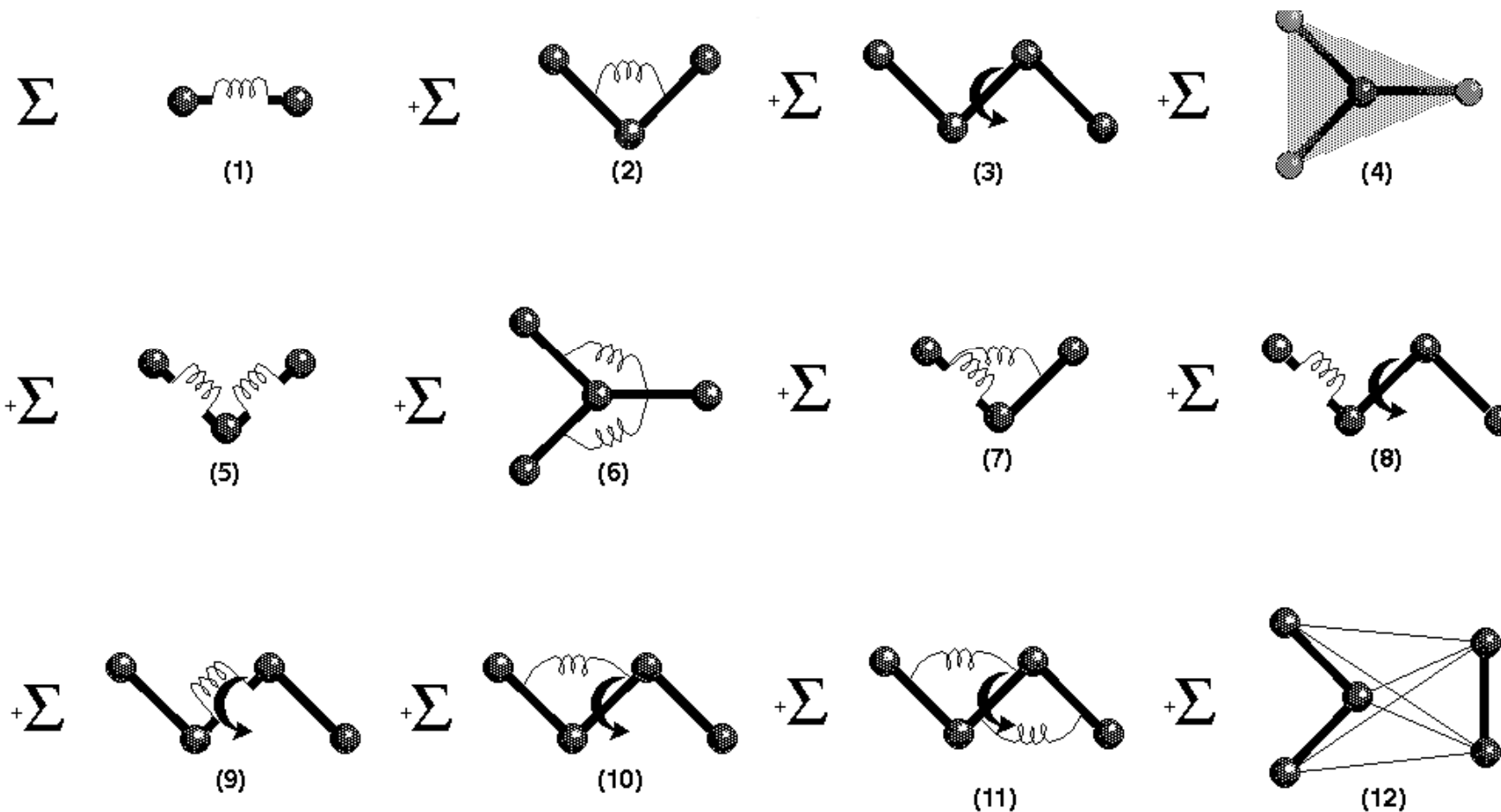
键合能

$$E_{\text{valence}} = E_{\text{bond}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{torsion}} + E_{\text{oop}} + E_{\text{UB}}$$

非键能

$$E_{\text{non-bond}} = E_{\text{vdW}} + E_{\text{Coulomb}} + E_{\text{hbond}}$$

力场表达式 – Part 2



CVFF 力场函数形式

$$E_{\text{pot}} = \sum_b D_b [1 - e^{-\alpha(b-b_0)}] + \sum_{\theta} H_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{\phi} H_{\phi} [1 + s \cos(n\phi)]$$

(1) (2) (3)

$$+ \sum_{\chi} H_{\chi} \chi^2 + \sum_b \sum_{b'} F_{bb'} (b - b_0) (b' - b'_0) + \sum_{\theta} \sum_{\theta'} F_{\theta\theta'} (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0)$$

(4) (5) (6)

$$+ \sum_b \sum_{\theta} F_{b\theta} (b - b_0) (\theta - \theta_0) + \sum_{\phi} F_{\phi\theta\theta'} \cos\phi (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0) + \sum_{\chi} \sum_{\chi'} F_{\chi\chi'} \chi \chi'$$

(7) (8) (9)

$$+ \sum \varepsilon [(r^*/r)^{12} - 2(r^*/r)^6] + \sum q_i q_j / \varepsilon r_{ij}$$

(10) (11)

PCFF 函数形式

$$E_{\text{pot}} = \sum_b [K_2 (b - b_0)^2 + K_3 (b - b_0)^3 + K_4 (b - b_0)^4] \quad (1)$$

$$+ \sum_{\theta} H_2 (\theta - \theta_0)^2 + H_3 (\theta - \theta_0)^3 + H_4 (\theta - \theta_0)^4 \quad (2)$$

$$+ \sum_{\phi} [V_1 [1 - \cos(\phi - \phi_1^0)] + V_2 [1 - \cos(2\phi - \phi_2^0)] + V_3 [1 - \cos(3\phi - \phi_3^0)]] \quad (3)$$

$$+ \sum_z K_z z^2 + \sum_b \sum_{b'} F_{bb'} (b - b_0) (b' - b'_0) + \sum_{\theta} \sum_{\theta'} F_{\theta\theta'} (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0) \quad (4) \quad (5) \quad (6)$$

$$+ \sum_b \sum_{\theta} F_{b\theta} (b - b_0) (\theta - \theta_0) + \sum_b \sum_{\phi} (b - b_0) [V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi] \quad (7) \quad (8)$$

$$+ \sum_{b'} \sum_{\phi} (b' - b'_0) [V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi] \quad (9)$$

$$+ \sum_{\theta} \sum_{\phi} (\theta - \theta_0) [V_1 \cos \phi + V_2 \cos 2\phi + V_3 \cos 3\phi] \quad (10)$$

$$+ \sum_{\phi} \sum_{\theta} \sum_{\theta'} K_{\phi\theta\theta'} \cos \phi (\theta - \theta_0) (\theta' - \theta'_0) + \sum_{i>j} \frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}} + \sum_{i>j} \left[\frac{A_{ij}}{r_{ij}^9} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right] \quad (11) \quad (12) \quad (13)$$

COMPASS 力场

- ❖ 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

H. Sun, J. Phys. Chem. B, 1998, 112: 7338-7364

COMPASS 力场主要添加的新功能：

- 新增**COMPASS II力场**添加对离子液体的支持，强化对聚合物和杂环体系的支持。新力场覆盖253种元素力场种类，包含8294种力场参数。在新的训练集中总共包含有1402种分子片段。

	COMPASS	COMPASS II
原素力场种类	229	253
力场参数	3856	8294

COMPASSII力场参数获取的训练集设置：

- 1) 使用COMPASS力场分析一个包含有430种单聚物和共聚物的**聚合物数据库**，查找到105种分子片段中454种相互作用关系的缺失，并将这些缺失添加到新训练集中。
- 2) 分析**NIST离子液体分子数据库**并添加40种片段到新训练集中。
- 3) 分析**Maybridge化合物数据库**中包含的59,465种分子，并添加1,257种片段到新训练集中。

非键截断

非键截断： 计算范德华和静电作用能时
 考虑体系中所有原子相互作用计算量庞大
 原子间距增加范德华和静电作用能减小很多
提高计算效率

非键截断函数：

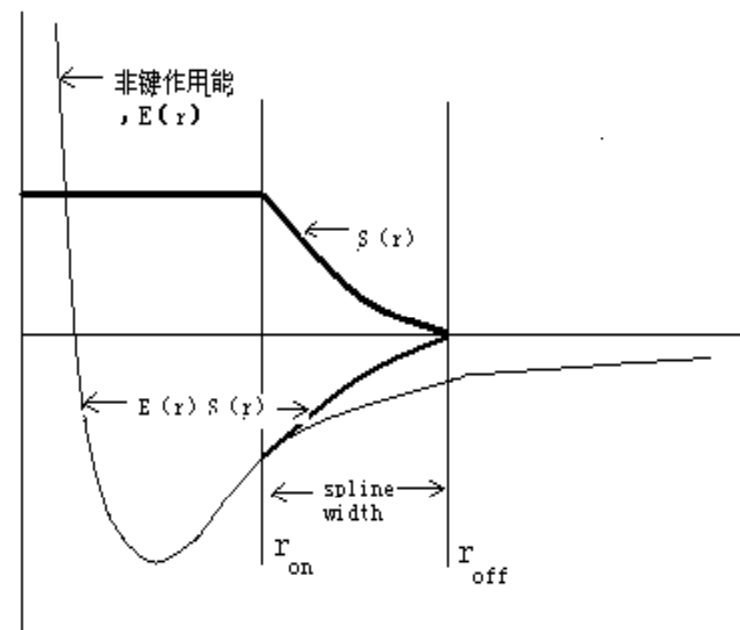
$$E_{elec} = \sum_r E_{elec}(r) S(r_{on}, r_{off})$$

$$E_{vdw} = \sum_r E_{vdw}(r) S(r_{on}, r_{off})$$

$r \leq r_{on}$ 时, $S=1$

$r_{on} \leq r \leq r_{off}$ 时, E 逐渐平滑下降到 0

$r \geq r_{off}$ 时, $S=0$



非键作用能截断函数

分子力学法

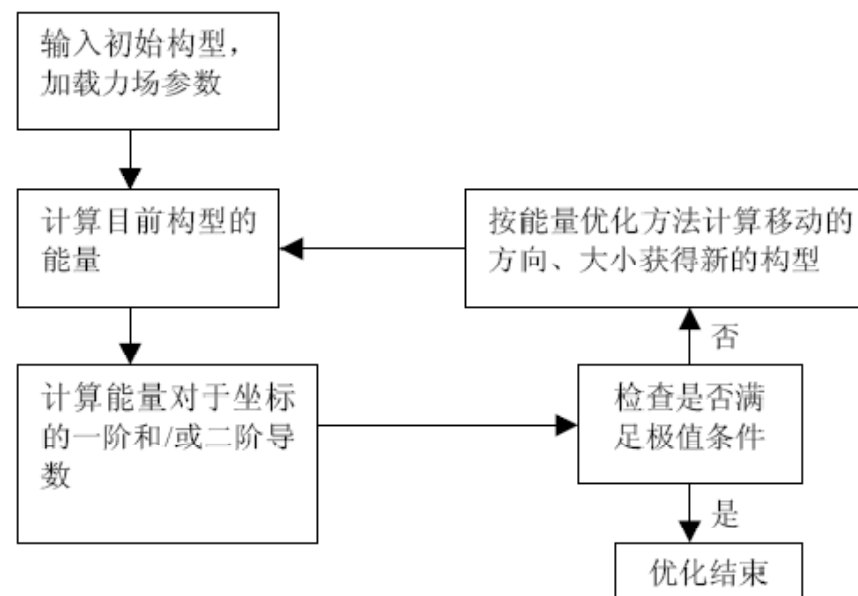
目的：合理的分子结构 \longrightarrow 能量最小化

单个分子—合理的键长、键角及相应二面角

多分子聚集体系—合理的分子间堆砌构型

势能对笛卡尔坐标的一阶导数为零，二阶导数大于零

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0 \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} > 0$$



结构优化法

最速下降法：方向变化大（接近极小点时方向不准）、收敛慢、优化幅度大；

共轭梯度法：收敛快，易陷入局部势阱，对初始结构偏离不大；

Newton法：计算量较大，当微商小时收敛快，远离极小点时方向不准；

动力学的背景

在分子动力学模拟中，测定一个可观测量，必须能将这个量表达为体系中粒子的位置与动量的函数。例如在一个多体体系中，对温度的方便定义是采用在所有自由度上的等配方能，以使它们以二次型进入哈密顿函数。特别是在各个自由度的平均动能，可得到：

$$\left\langle \frac{1}{2} m v_{\alpha}^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

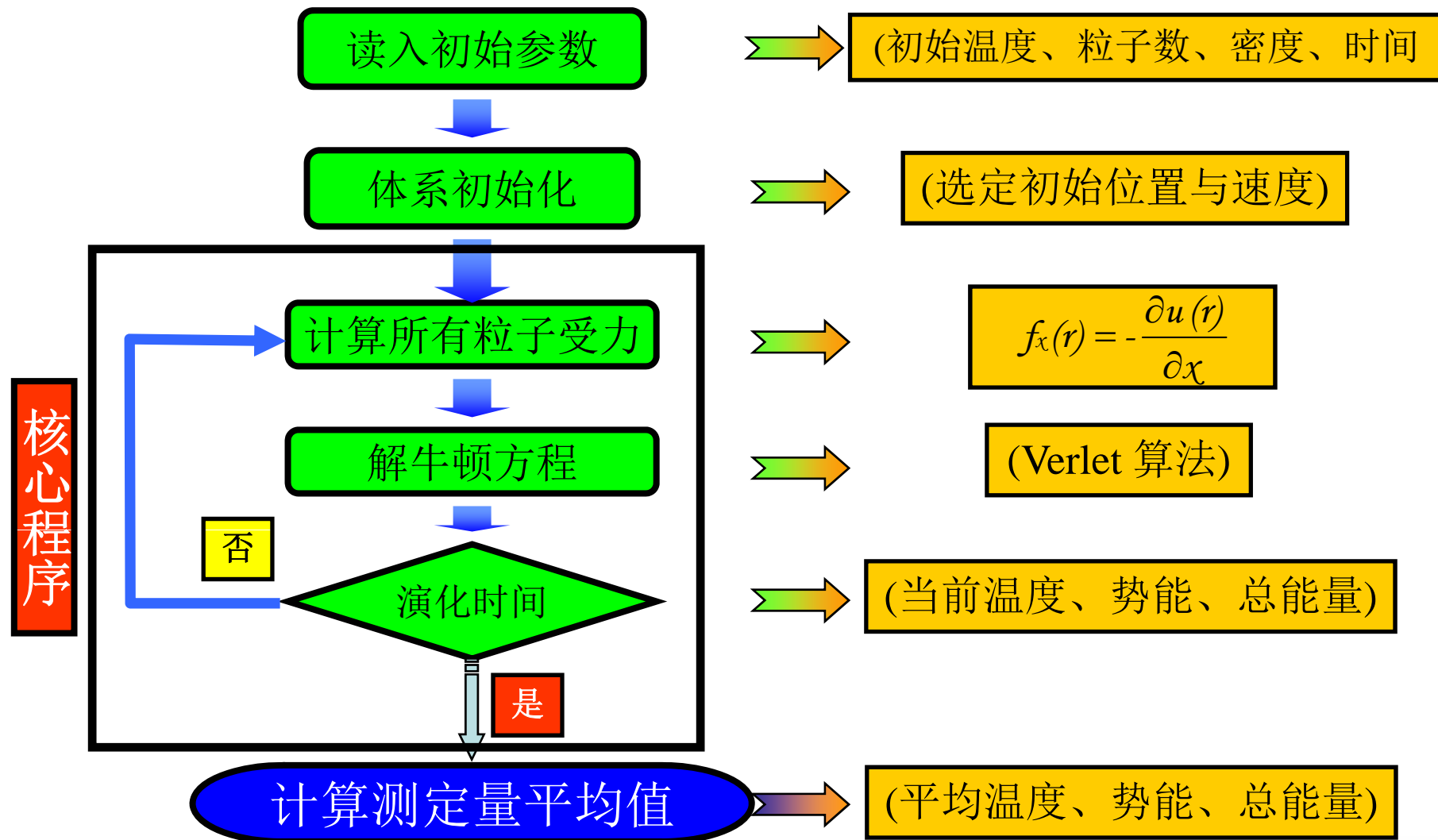
在模拟中，用这一方程作为温度的实际定义。实际过程中，测量体系的总动能，并除以体系的自由度数 N_f ，由于体系的总动能涨落，体系的瞬时温度也随之改变，

$$T(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2(t)}{k_B N_f}$$

温度的相对涨落为 $1/\sqrt{N_f}$ 左右。由于 N_f 一般为100-1000，因此温度的统计涨落约为5%~10%。要达到温度的一个正确估计，应对许多涨落进行平均才行。

一般流程

注释



分子动力学法

数值求解方法—有限差分方法

Verlet算法、Predictor-corrector算法、各自的变种

Verlet类型的算法是目前性能最好、应用最广的积分算法

统计力学

粒子系综 微观水平信息 ———— 宏观性质

微正则系综(NVE)—孤立的保守系综，系统的总动量 $\sum P=0$

等焓等压系综(NPH)—晶胞体积和形状可变

正则系综(NVT)—系统能量可能有涨落但系综温度保持恒定

等温等压系综(NPT)—与外界可进行能量交换

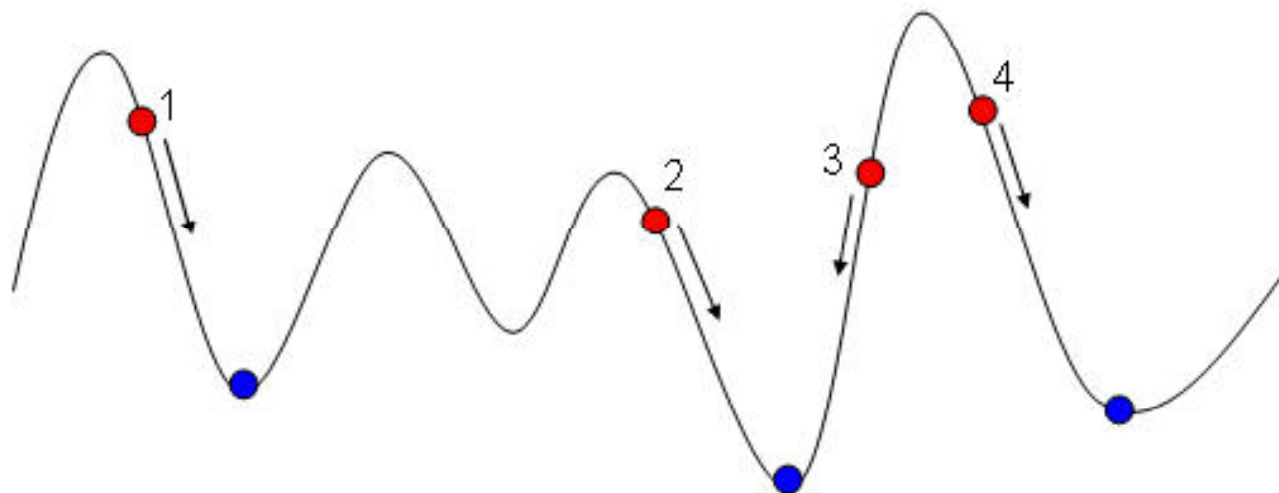
温度控制 动能势能相互转化，动能与温度存在统计关系

动能变化导致温度变化

为不断接近目标温度，速率应得到适当调整

速率法、Berendsen、Nose和Andersen方法

结构优化与动力学的异同点



相同：

Minimizer与Dynamics都是寻找能量最低点的方法。

区别：

Minimizer只能够找到与其相邻的能量最低结构，但是不能够找到全局能量最低结构。OK

Dynamics可以考虑温度因素，通过加入能量扰动来搜索势能面，从而找到全局最优结构。

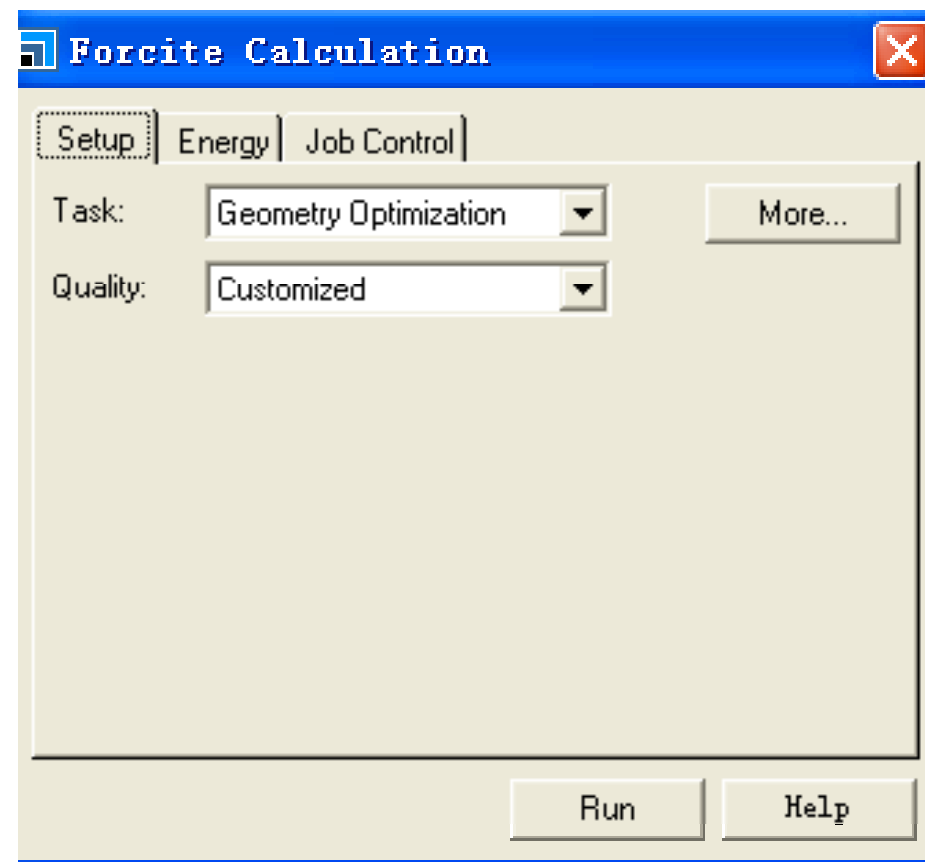
Forcite Plus的参数设置

Setup菜单

- 计算任务(Task)

单点能计算；几何优化
； 动力学计算； 淬火模拟
； 退火模拟； 内聚能密度
的计算； 力学特性的计算

- 精度控制(Quality)



Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----

Geometry Optimization/More

- 算法(Algorithm)
精确算法(Smart); 最速下降法(Steepest descent); 共轭梯度法(Conjugate gradient); 牛顿法(Quasi-Newton); ABNR法
- 精度控制(Quality)
能量(Energy); 力(Force); 应力(stress); 位置(Displacement)
- 模拟时间(max.iterations)
- 静态压力(external pressure)
- 优化单胞(optimize cell)
- 运动单元(Motion groups)

Forcite Geometry Opti...

Algorithm: Smart

Convergence tolerance

Quality: Fine

☒ Energy: 1.0e-4 kcal/mol

☒ Force: 0.005 kcal/mol

☒ Stress: 0.005 GPa

☒ Displacement: 5.0e-5 Å

Max. iterations: 6000

External pressure: 0.0 GPa

☒ Optimize cell

Motion groups

☐ Keep motion groups rigid More ...

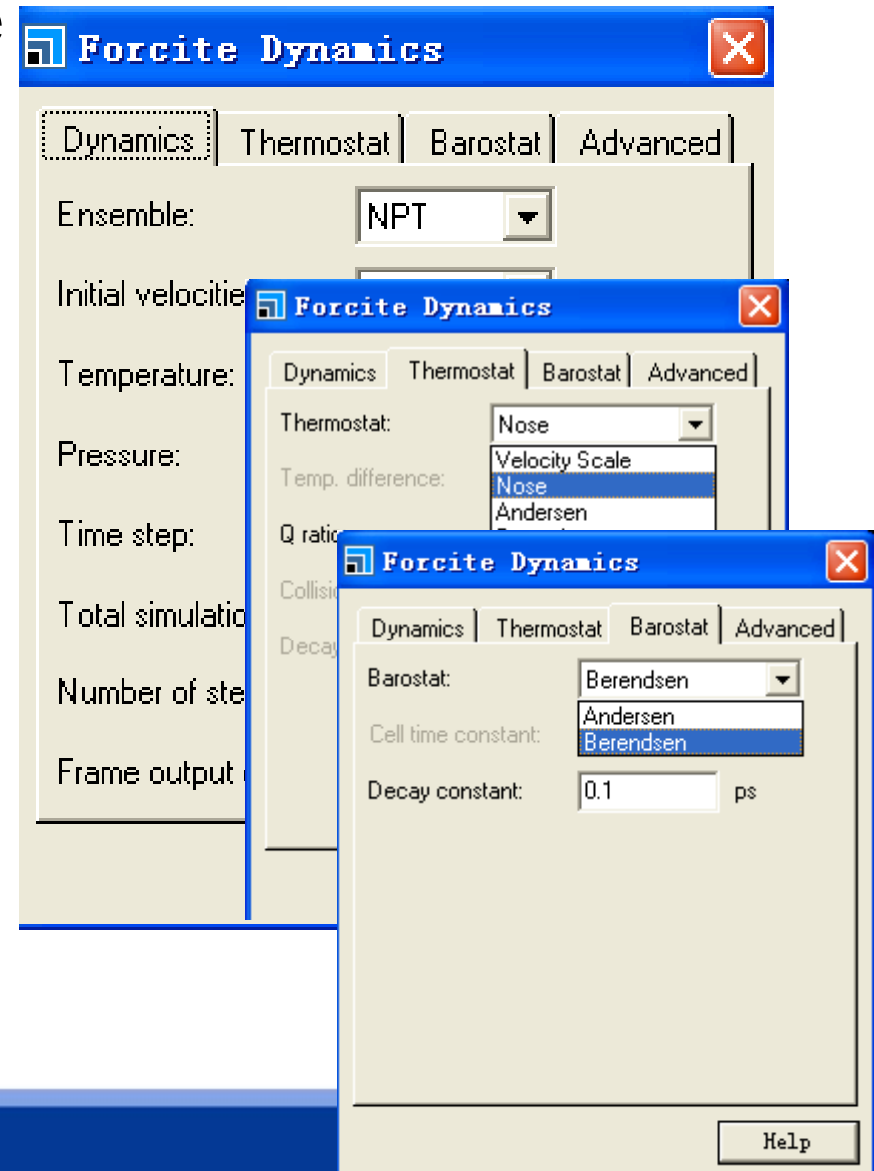
☐ Ignore invariant terms

Help

Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----Dynamics/More

- 系统(Ensemble)
NVT, NPH, NVE, NPT
- 初始速度(Initial velocities)
任意的(Random); 当前的(current)
- 温度(Temperature)以及控温方法
速率法; Nose法; Andersen法;
Berendsen法
- 压力(pressure)以及控压方法
Andersen法; Berendsen法
- 时间步长(Time step)
- 总模拟时间(Total simulation time)
- 模拟步数(Number of steps)
- 每多少步输出运动单元(Motion groups)



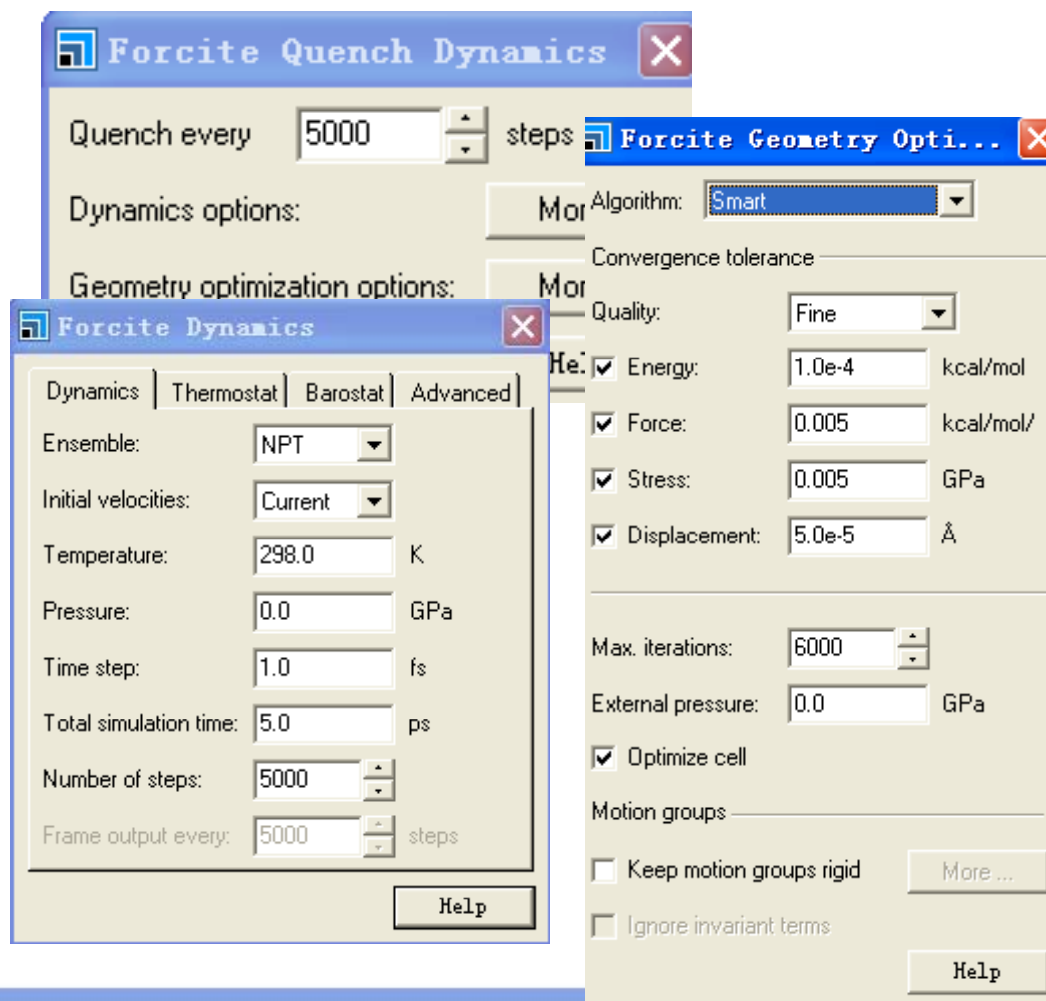
Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----Quench /More

- 淬火步数(Algorithm)
控制了MD中输出构象的步数
- 动力学选项
- 几何优化选项

淬火模拟指的是
每进行一次MD,
则进行一次几何
优化

灰色

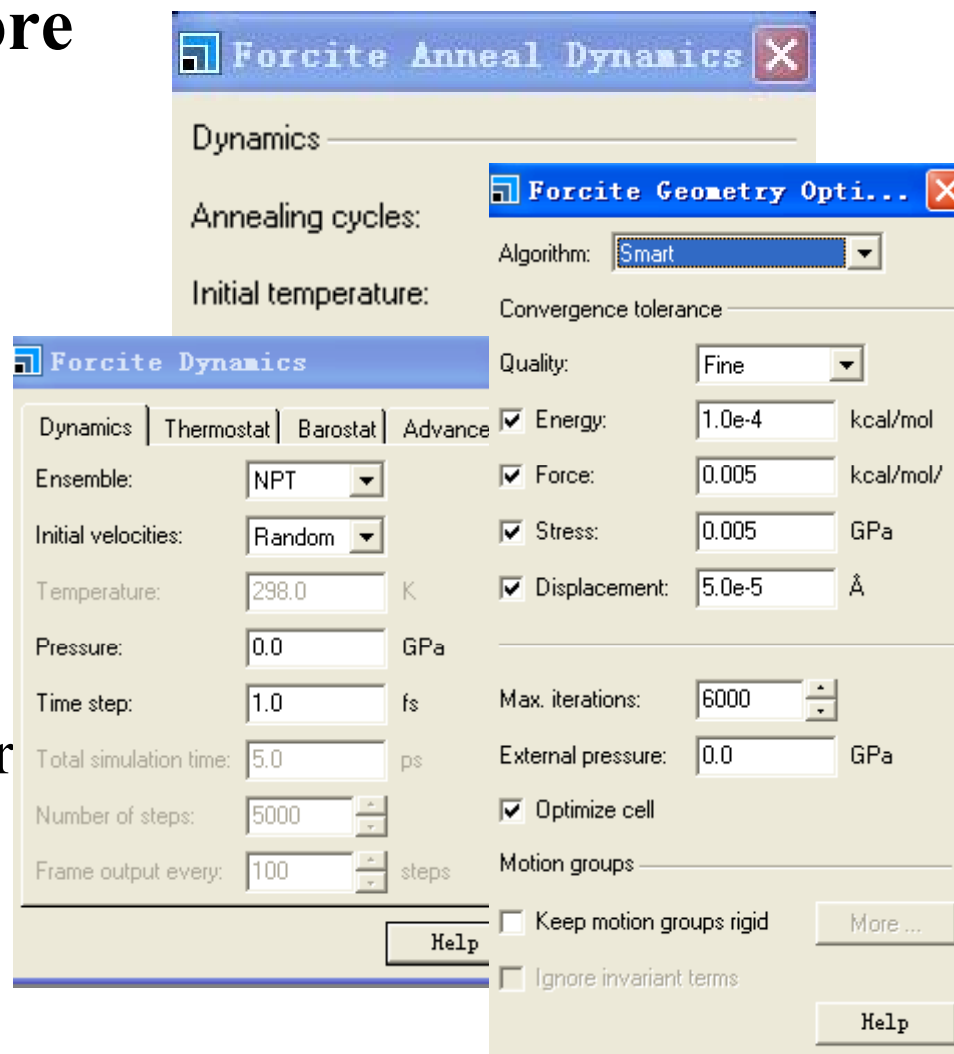


Forcite Plus的参数设置

Setup菜单-----Anneal /More

- 退火循环数(Algorithm)
- 初始温度(Initial temperature)
- 中间循环温度(Mid-cycle temperature)
- 初始温度与中间循环温度之间取得温度点个数
- 每个温度点动力学模拟步数
- 总的模拟步数 (Total number of steps)
- 几何优化

灰色



Forcite Plus的参数设置

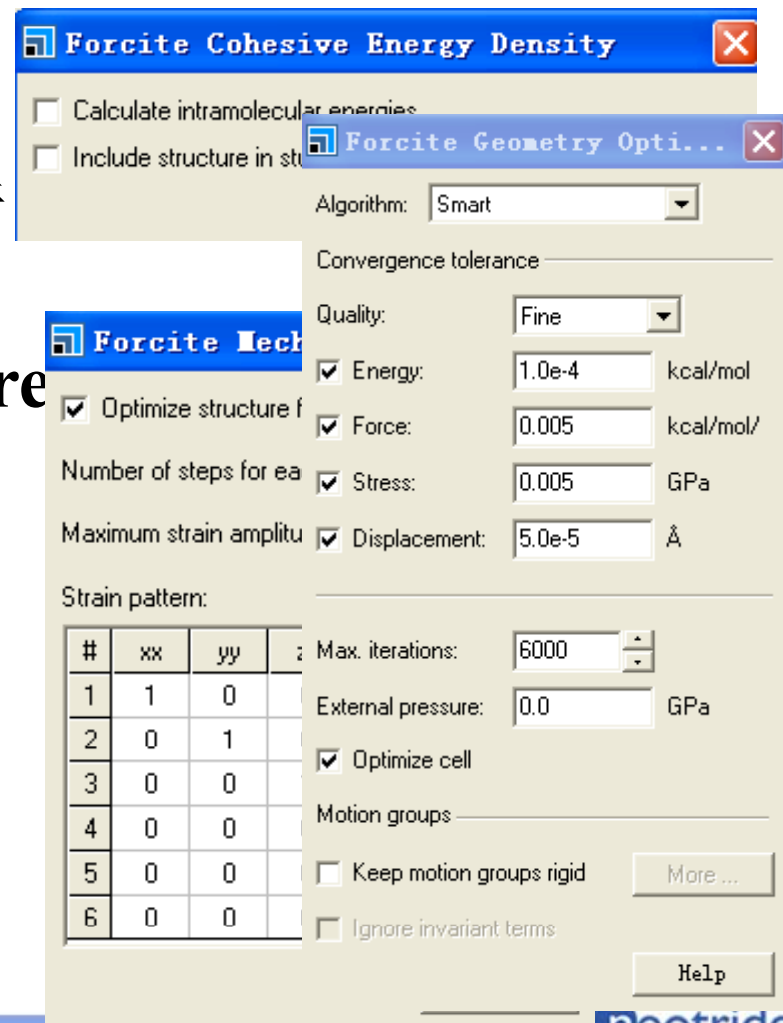
Setup菜单-----Cohesive Energy Density/More

- 计算分子内相互作用
输出Study Table文件
- Study table中包括输入的结构文件

Setup菜单-----

Cohesive Energy Density/More

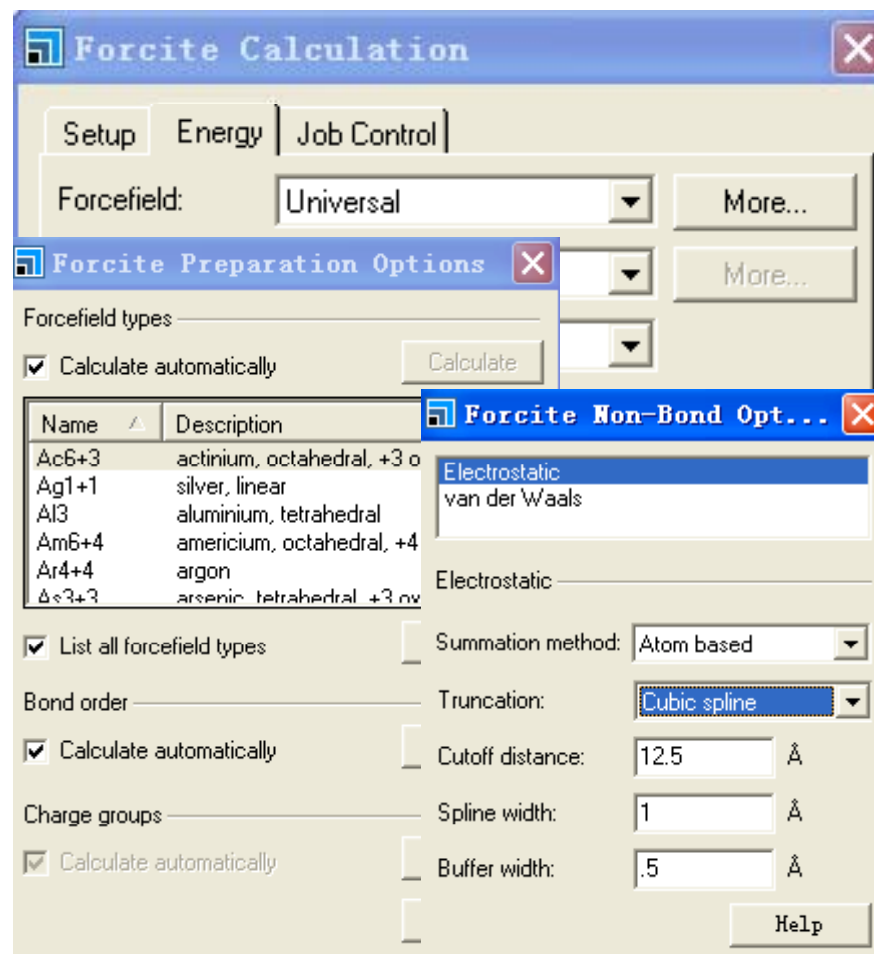
- 优化结构
- 明确应变模式中产生的应变数目
推荐使用偶数值（2-100）
- 指出结构最大的形变
值在0.001-0.1之间较为合理
- 应变模式(Strain Pattern)
应变张量矩阵，由结构对称性决定



Forcite Plus的参数设置

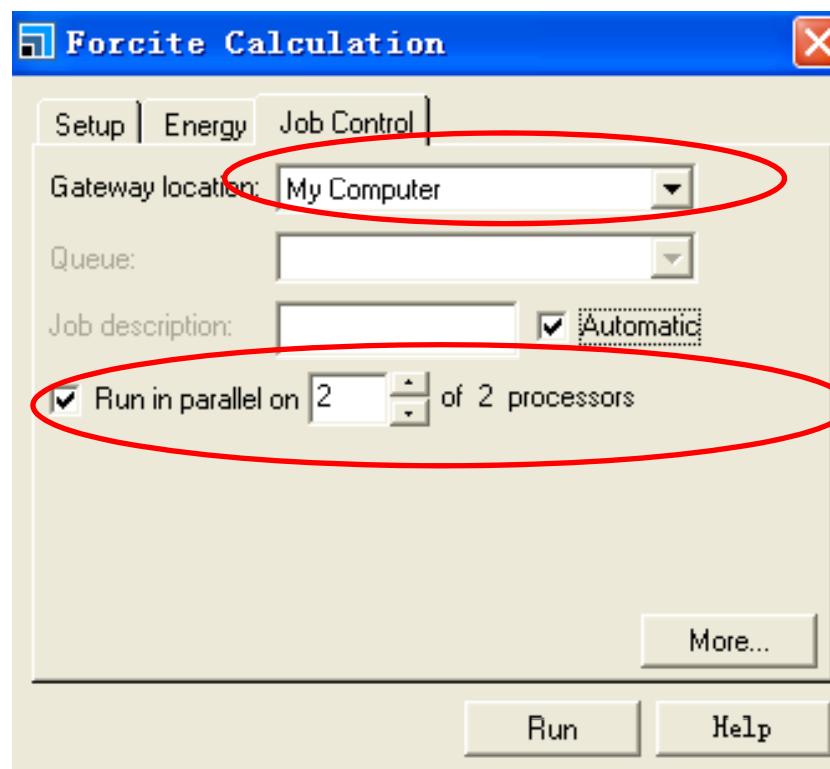
Energy 菜单

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



Forcite Plus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。

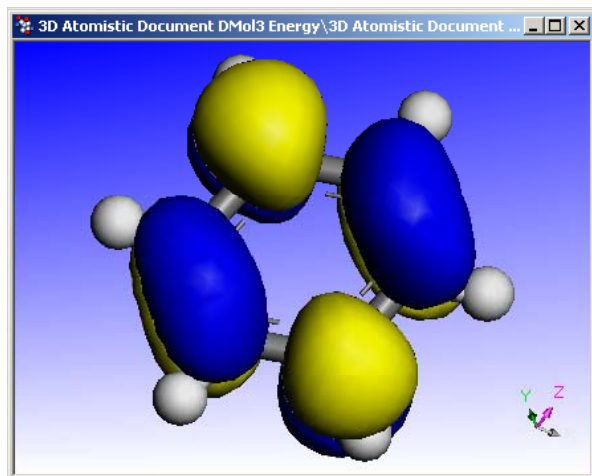
Forcite Plus模块支持多CPU并行计算并有很好的并行计算效率

Forcite Plus的参数设置

客户端

客户端-服务器工作模式

服务器



Gateway



Finished successfully !

Hardware: PC

Laptop

Workstation

OS: Windows2000

WindowsXP

Windows Vista

Hardware: PC

Workstation

HPC machine

OS: Windows2000

WindowsXP

Windows Vista

Windows2003 Server

RedHat AS4.0/5.0

SLES 9.0/10.0

Forcite Plus的参数设置

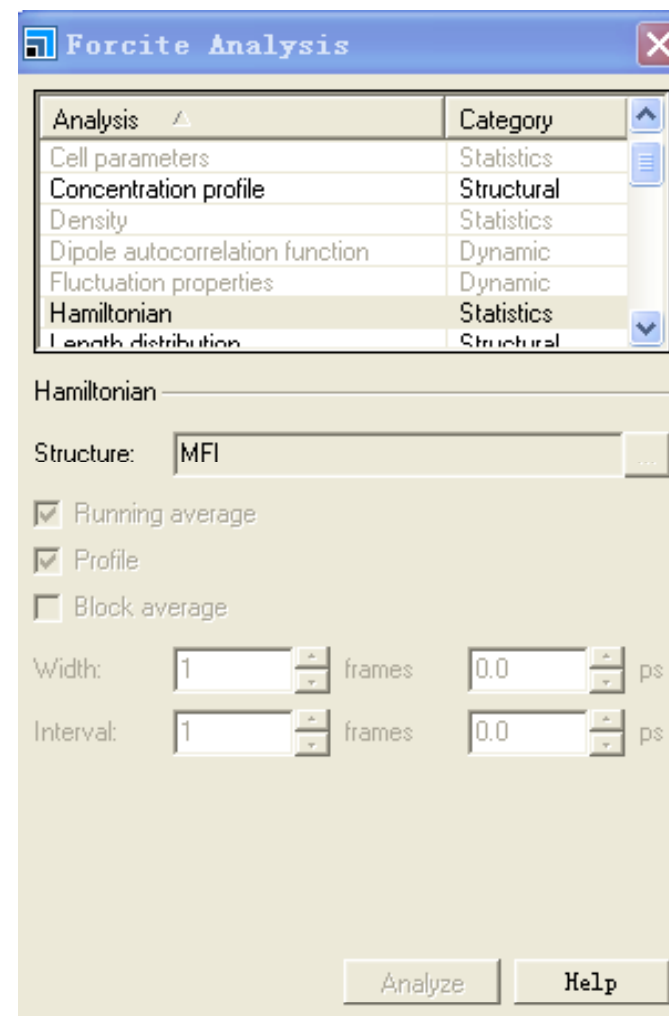
Analysis菜单

- 学习表中观察并绘制轨迹数据
- 速度相关函数
- 总动能
- 距离、角度和旋转半径分布
- 温度、压力
- 应力相关函数
- 取向关联函数
- 散射曲线
- 径向分布函数
- 势能项组成
- 均方位移（研究扩散）
- 焓变
- 动态波动特征
- 偶极相关函数
- 密度、单胞参数
- 浓度分布曲线（研究元素分布）

结构；

统计学性质；

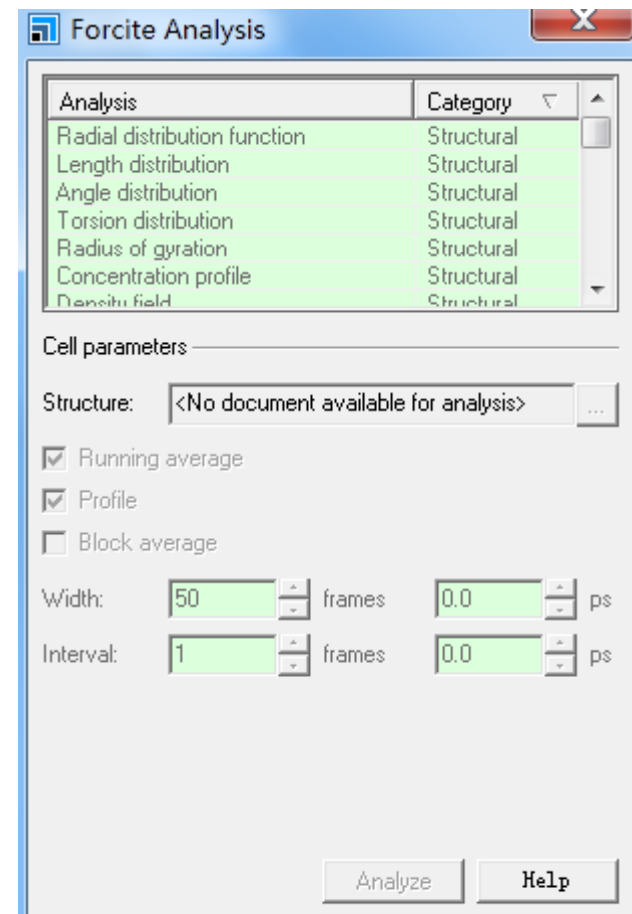
动力学性质等



Forcite Analysis

与结构相关的性质：

- Angle distribution
- Concentration profile
- Density field
- Length distribution
- Radial distribution function
- Radius of gyration
- Scattering
- Spatial orientation correlation function
- Torsion distribution

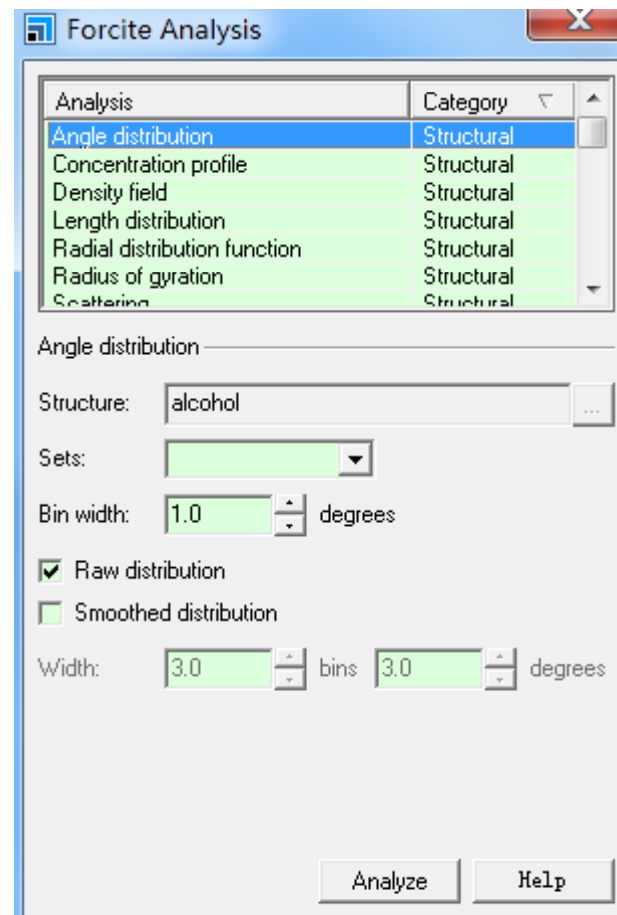


Forcite Analysis

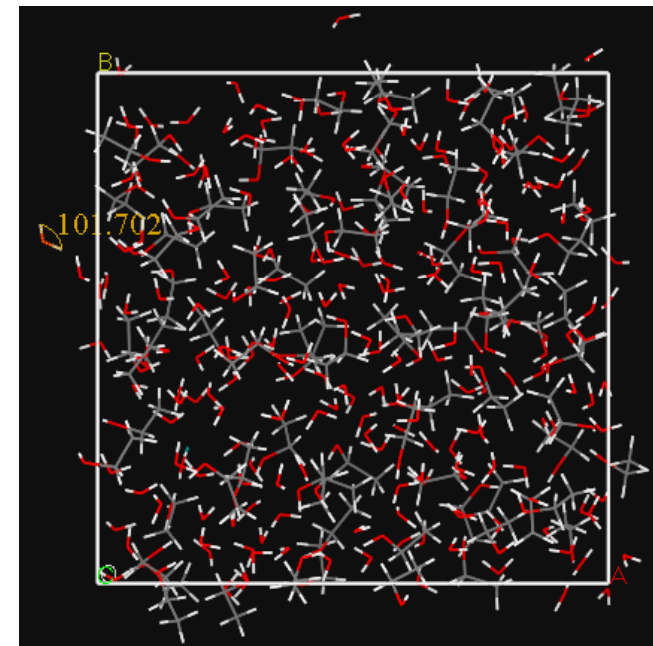
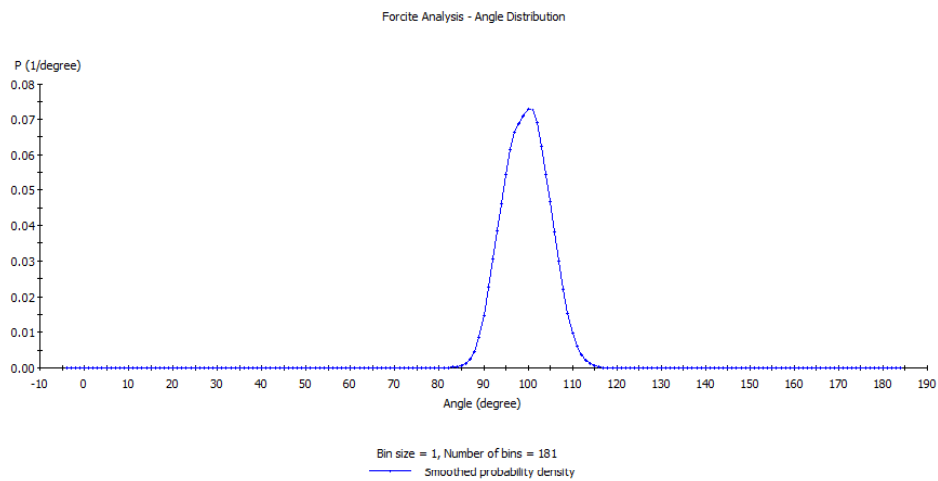
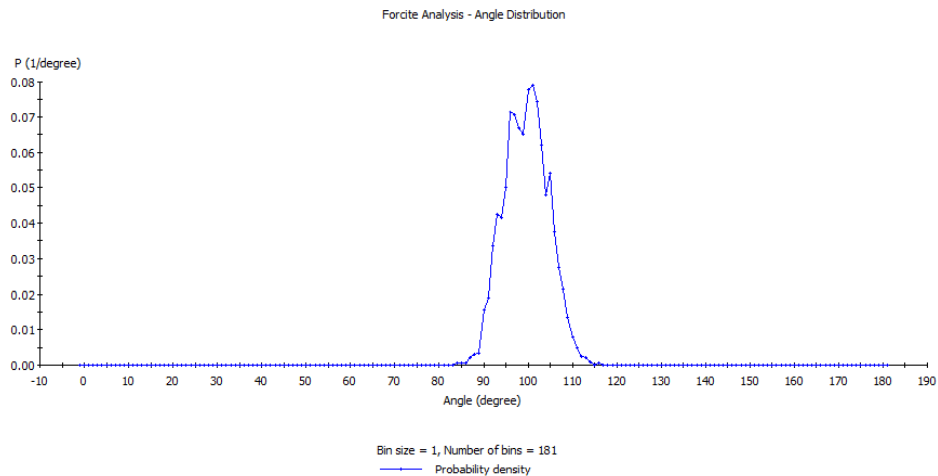
与结构相关的性质：[Angle distribution](#)

分析结构/轨迹中角度的分布几率，分析前需首先量出需要分析的角度。

- Structure/Trajectory：用于选择结构或轨迹，默认为当前激活文件
- Sets：当存在多个set时，用于指定某个set，或在结构中手动选中。不选等价于对所有set分析。
- Bin width：直方图中小区间的宽度。合适的数值可以得到高分辨的图形
- Raw distribution：绘制角度的几率密度图
- Smoothed distribution：绘制平滑的几率密度图
- Width：平滑函数的宽度



Forcite Analysis

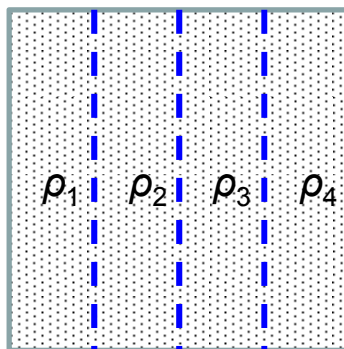


Forcite Analysis

与结构相关的性质：**Concentration Profile**

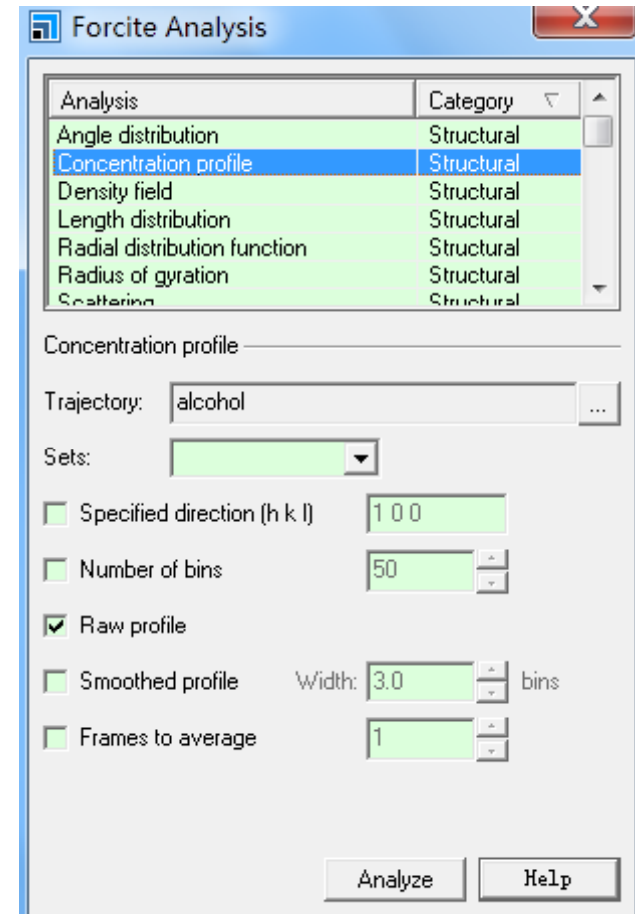
浓度分布曲线，表示粒子在一定厚度区间（slab）中的密度与其在体系中密度的比值。

- Specified direction (h k l)：指定密勒晶面。垂直于该面的浓度分布。
- Number of bins：区间的个数。
- Frames to average：轨迹将分割为若个数据块，每个数据块均单独计算。

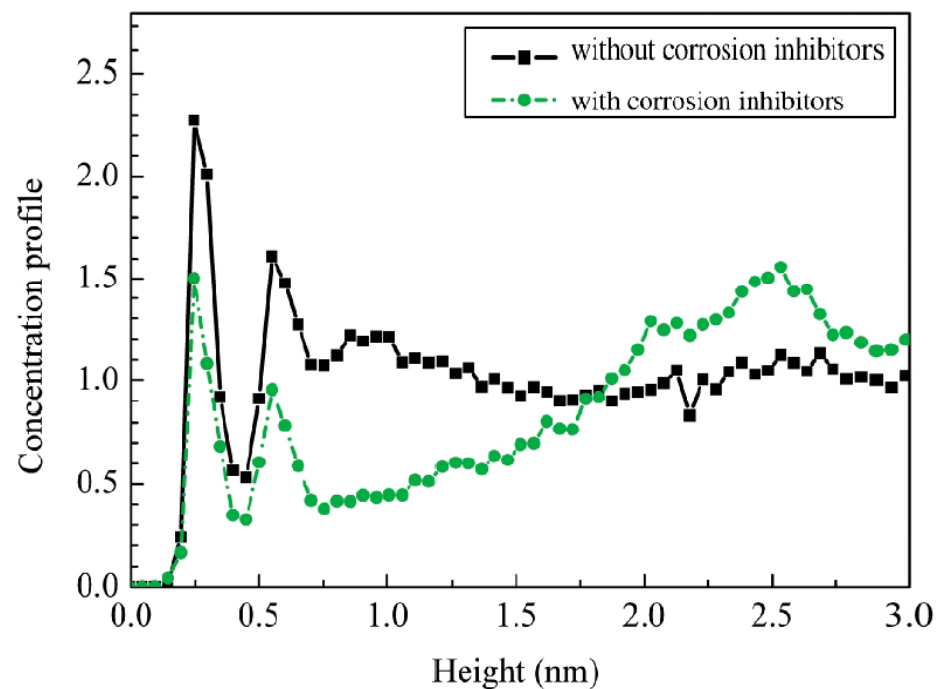
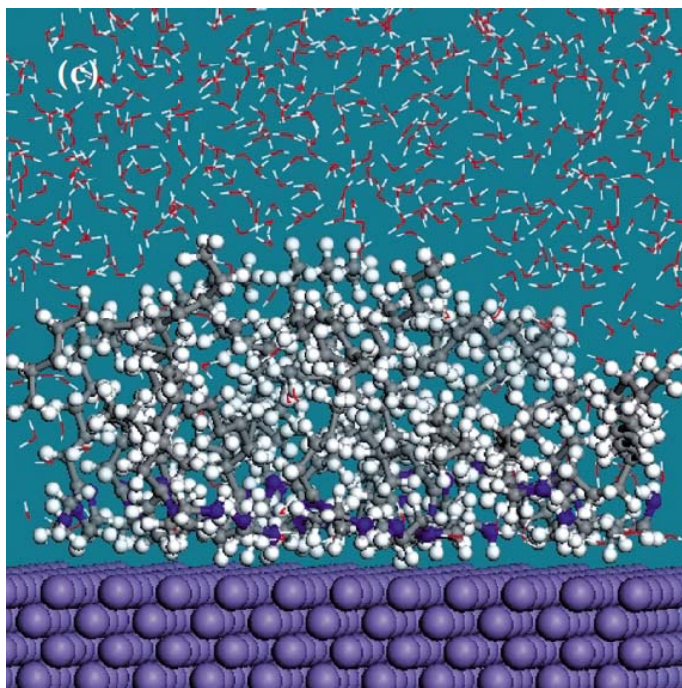


Concentration Profile

$$= \frac{\rho_i}{\rho_{\text{total}}} \quad (i=1,2,3,4)$$



Forcite Analysis



通过水分子的浓度分布曲线，缓蚀剂的加入有效的降低了水分子在金属表面的浓度，起到了阻断水分子与金属表面接触的作用。

Acta Phys. -Chim. Sin., 2010, **26**(5) : 1385-1390

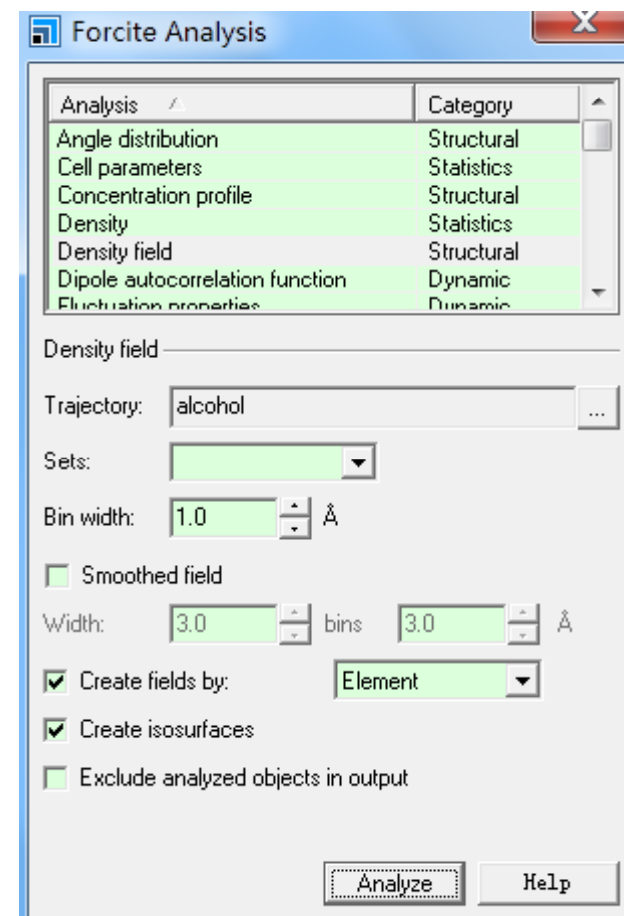
Forcite Analysis

与结构相关的性质：Density field

创建3D图形来显示结构/轨迹中元素种类/不

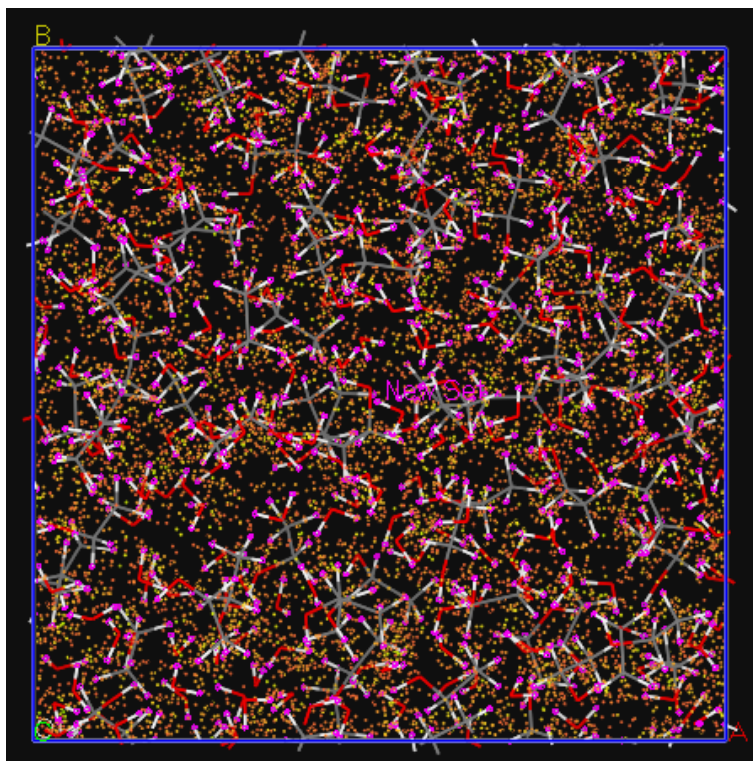
同力场类型的密度

- Create fields by：根据什么标准产生密度分布：
元素类型、力场类型
- Create isosurfaces：创建并显示等值面
- Exclude analyzed objects in output：在输出结果中不显示指定的Sets

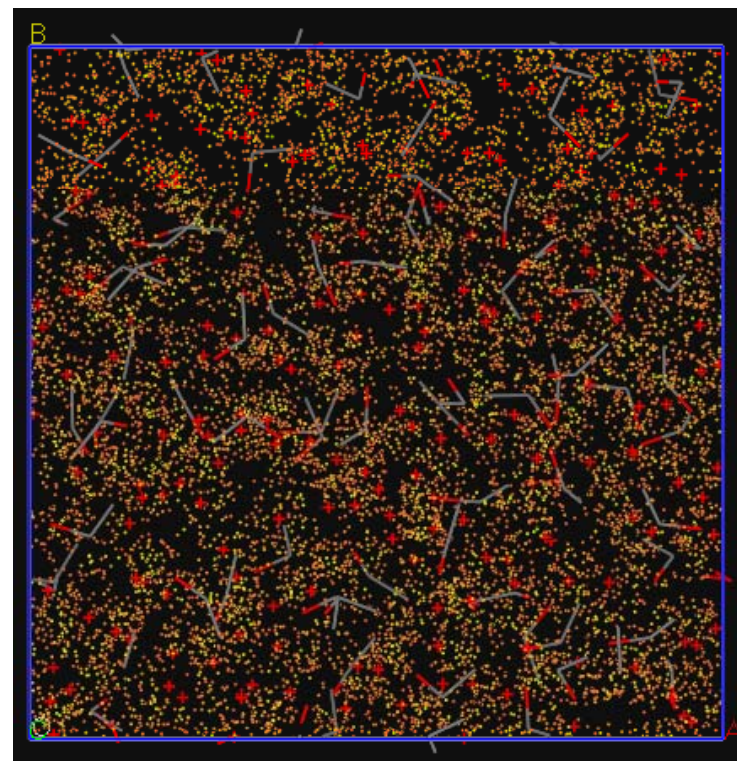


Forcite Analysis

Without Exclude

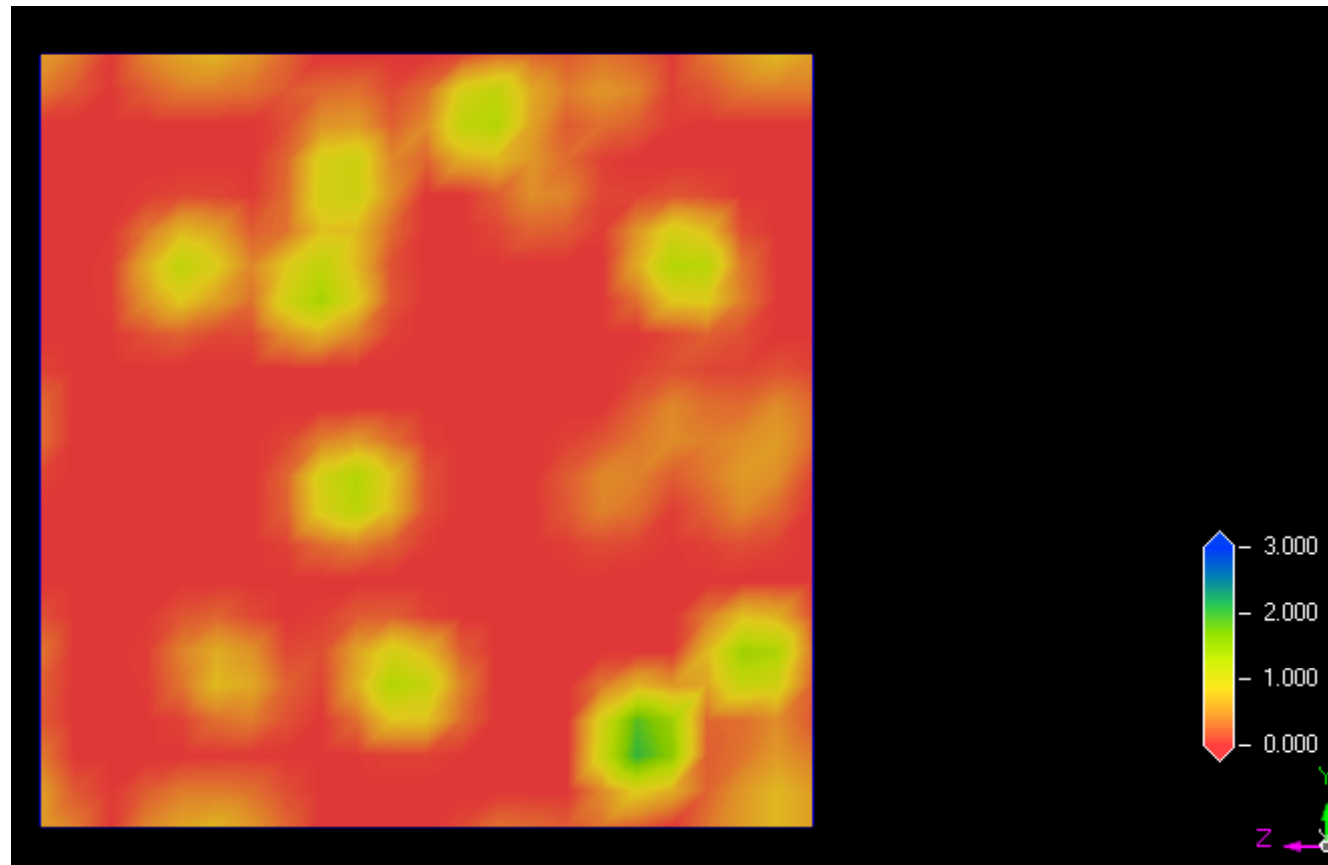


Exclude



经过Exclude 后，设为set的H原子全部不再显示出来

Forcite Analysis

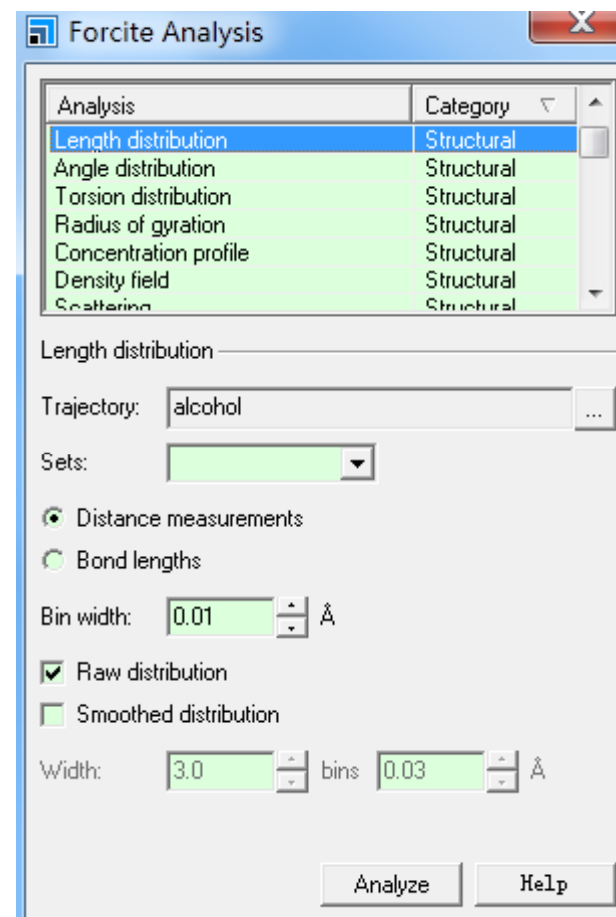


Forcite Analysis

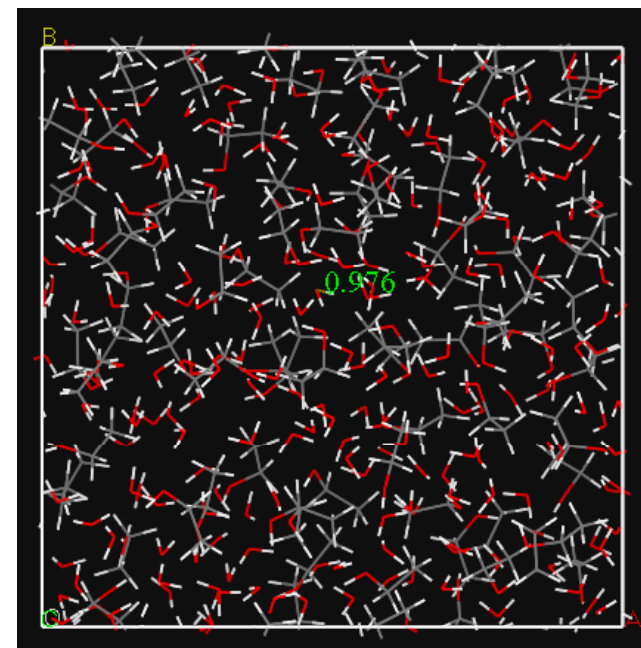
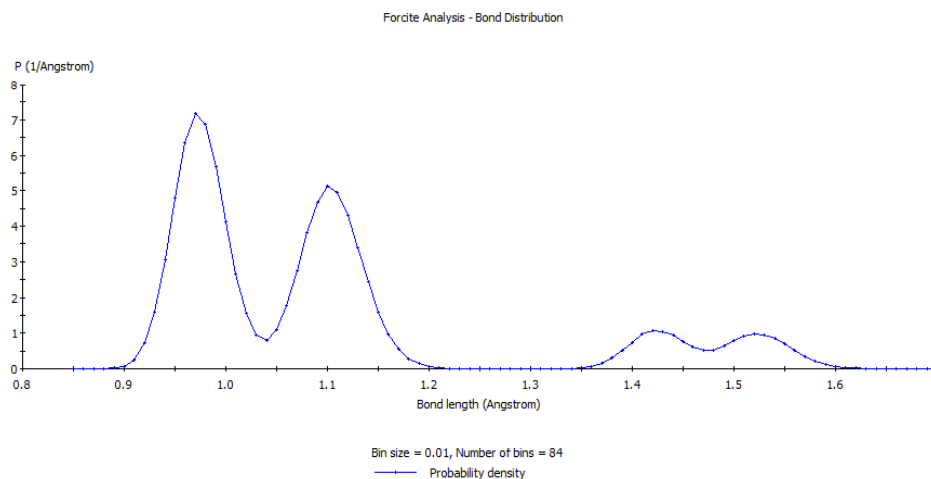
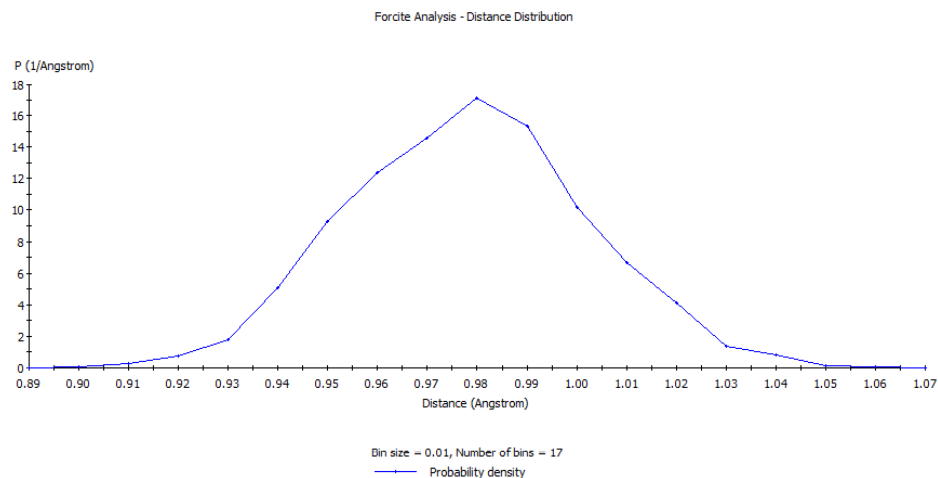
与结构相关的性质：[Length distribution](#)

分析结构/轨迹中长度或键长的分布几率，
长度分析前需首先量出。

- Distance measurements：分析结构或轨迹中已测量出的长度。若设定了Sets，则分析两者共有部分，若没有设定，则分析所有已测量的长度。
- Bond lengths：分析结构或轨迹中的键长。若设定了Sets，则分析两者共有部分，若没有设定，则分析所有键长。



Forcite Analysis



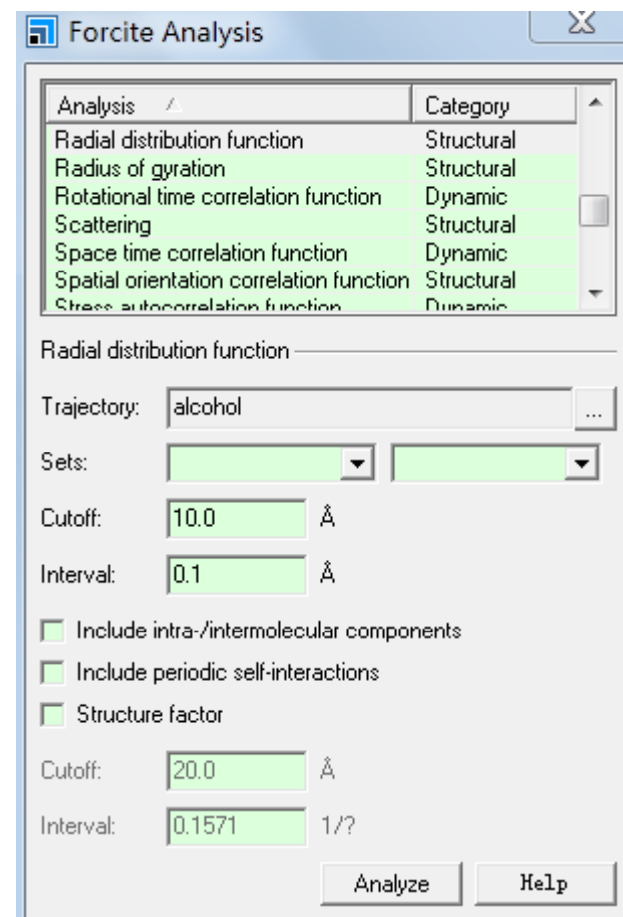
Forcite Analysis

与结构相关的性质：

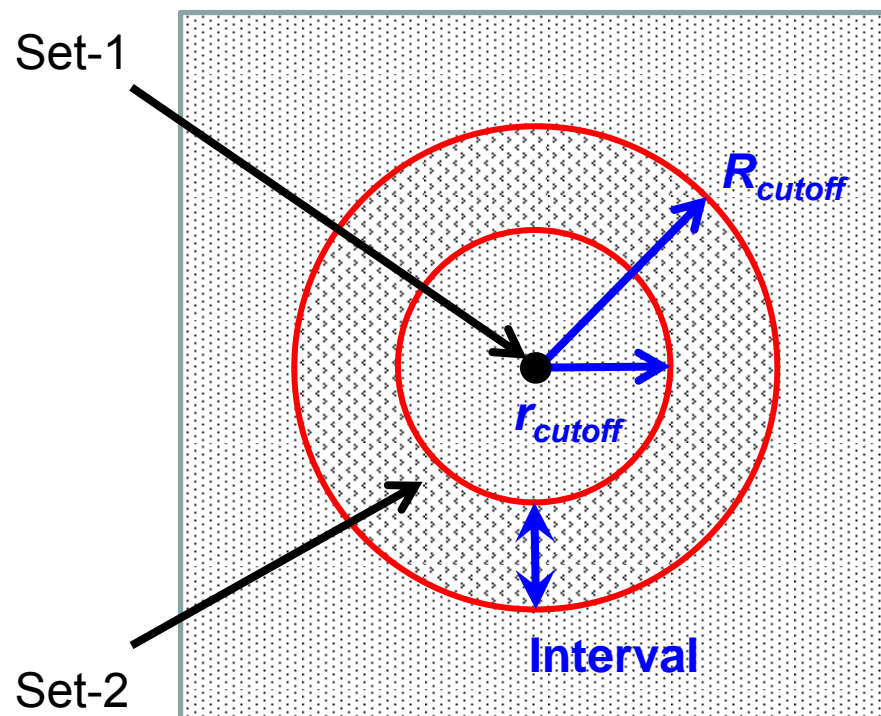
Radial distribution function (RDF)

计算组元之间的径向分布函数

- Sets：计算以Set-1为中心，Set-2的径向分布
- Cutoff：计算径向分布的距离截断
- Interval：统计径向分布的区间的宽度
- Include intra-/intermolecular components：计算径向分布时包含分子内/分子间的作用
- Include periodic self-interactions：计算径向分布时包含周期性的镜像
- Structure factor：通过径向分布函数计算结构因子
- Cutoff：计算结构因子的距离截断
- Interval：计算结构因子的间隔，小的间隔可以得到高分辨的谱图



Forcite Analysis



Radial Distribution Function

$$g(R) = \frac{\frac{N}{\frac{4}{3}\pi(R_{cutoff}^3 - r_{cutoff}^3)}}{\rho_{total}}$$

Coordination Number

$$N = g(R) * \rho_{total} * \frac{4}{3}\pi(R_{cutoff}^3 - r_{cutoff}^3)$$

Forcite Analysis

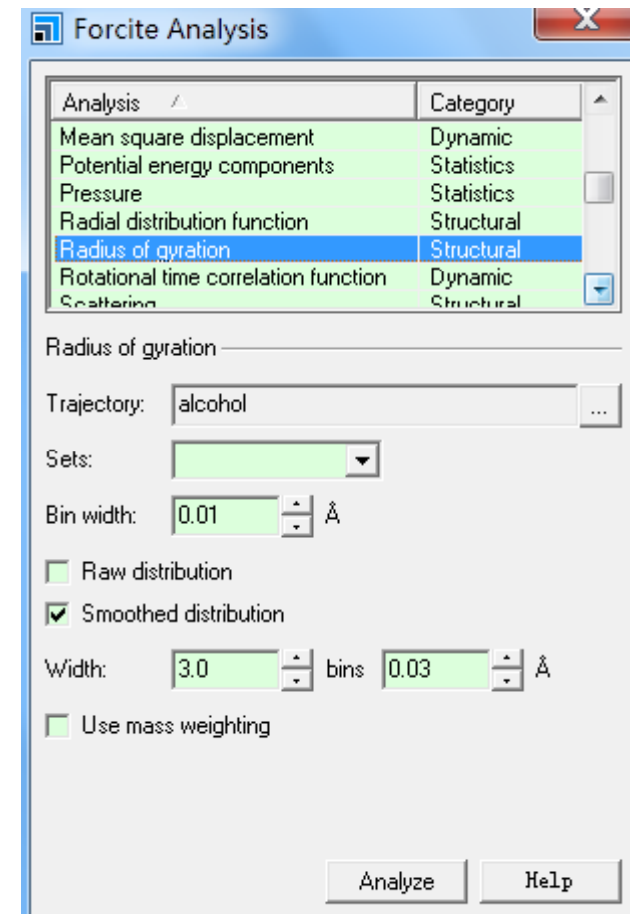
与结构相关的性质：Radius of gyration

分析体系的回转半径的几率分布

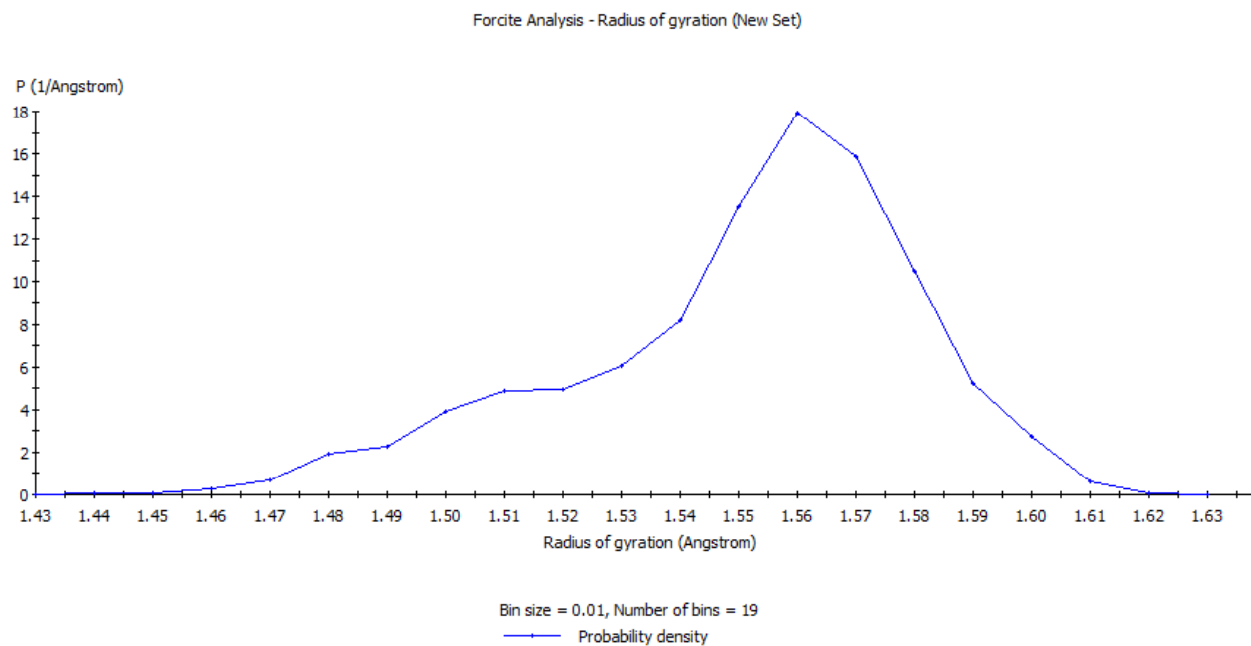
$$R(g)^2 = \frac{\sum_{i=1}^N s_i^2}{N}, s_i \text{ 为 } i \text{ 原子到质心的距离}$$

- Use mass weighting：计算回转半径时考虑原子的质量，否则认为所有原子质量相同

$$R(g)^2 = \frac{\sum_{i=1}^N m_i s_i^2}{\sum_{i=1}^N m_i}$$



Forcite Analysis



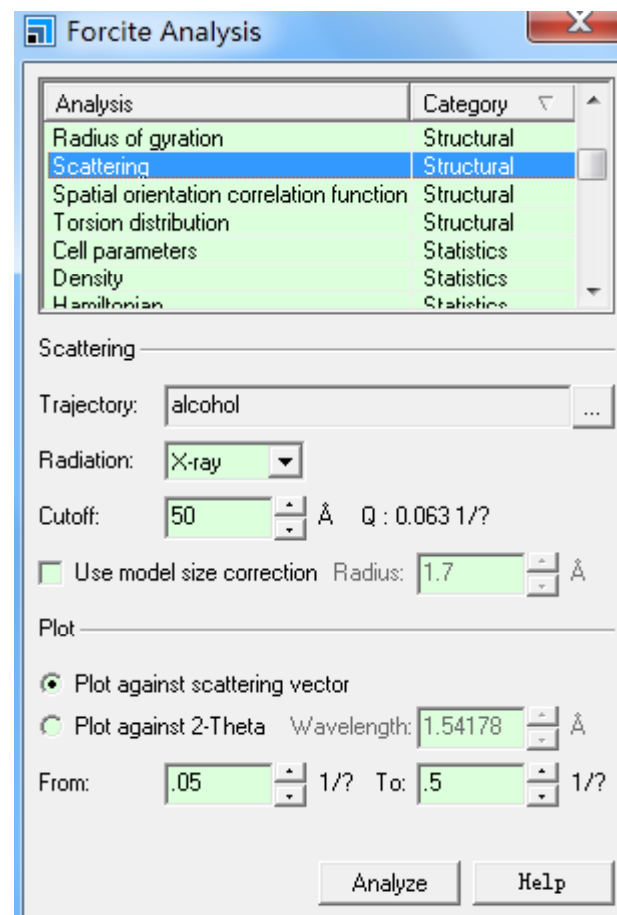
Radius of gyration	P
1.43000000	0.00000000
1.44000000	0.09995002
1.45000000	0.09995002
1.46000000	0.29985007
1.47000000	0.69965017
1.48000000	1.89905047
1.49000000	2.29885057
1.50000000	3.94802599

Forcite Analysis

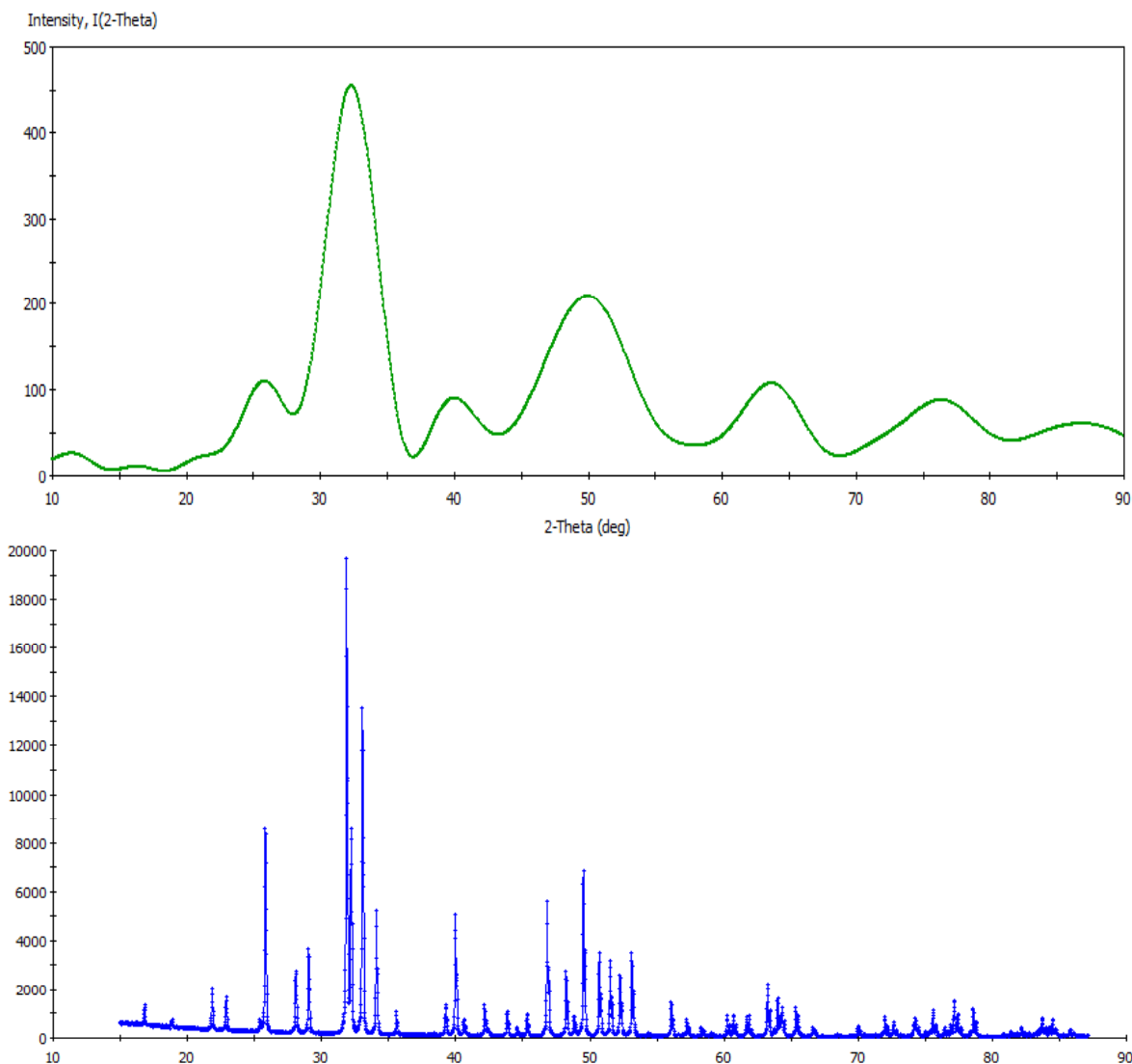
与结构相关的性质： **Scattering**

计算体系的中子或X射线散射谱

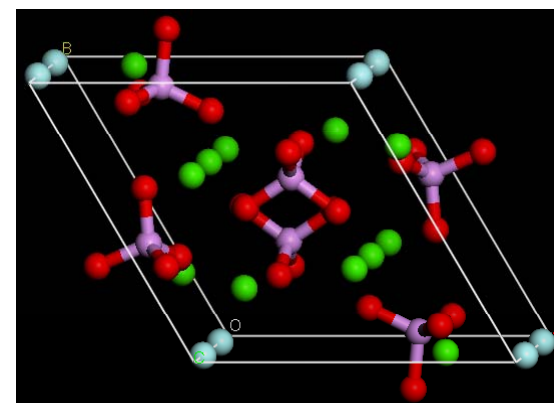
- Radiation：选择辐射源，中子/X射线
- Cutoff：散射强度计算的截断值。截断大时，小角度散射的贡献大
- Use model size correction：针对有限大小的分子进行的散射进行模型大小补偿，一般用于非周期的小结构
- Radius：模型大小校正的半径大小
- Plot against scattering vector、Plot against 2-Theta：绘制散射谱时的横坐标轴，散射向量/ 2θ 角
- Wavelength：散射采用的辐射波长
- From/To：指定散射强度的计算范围



Forcite Analysis



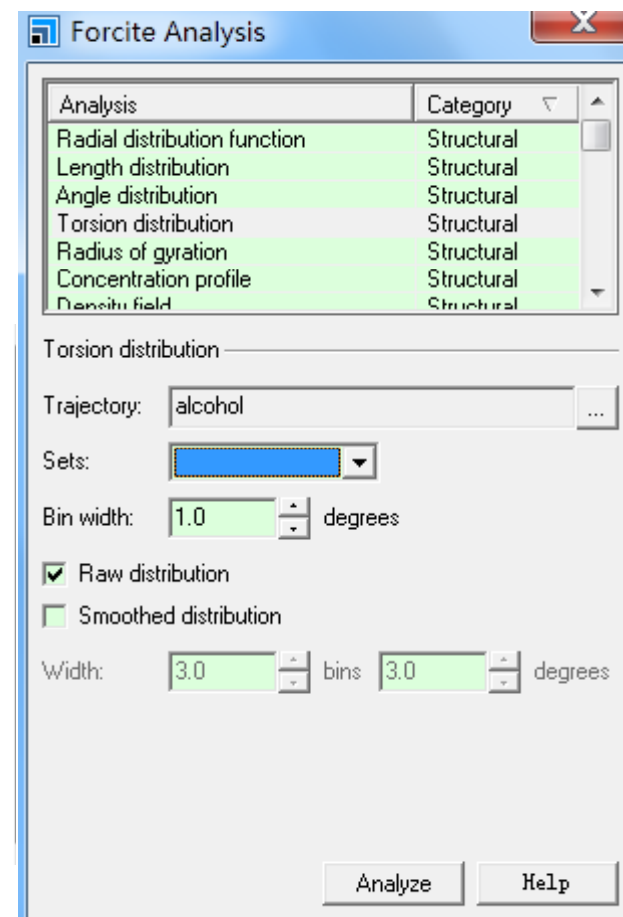
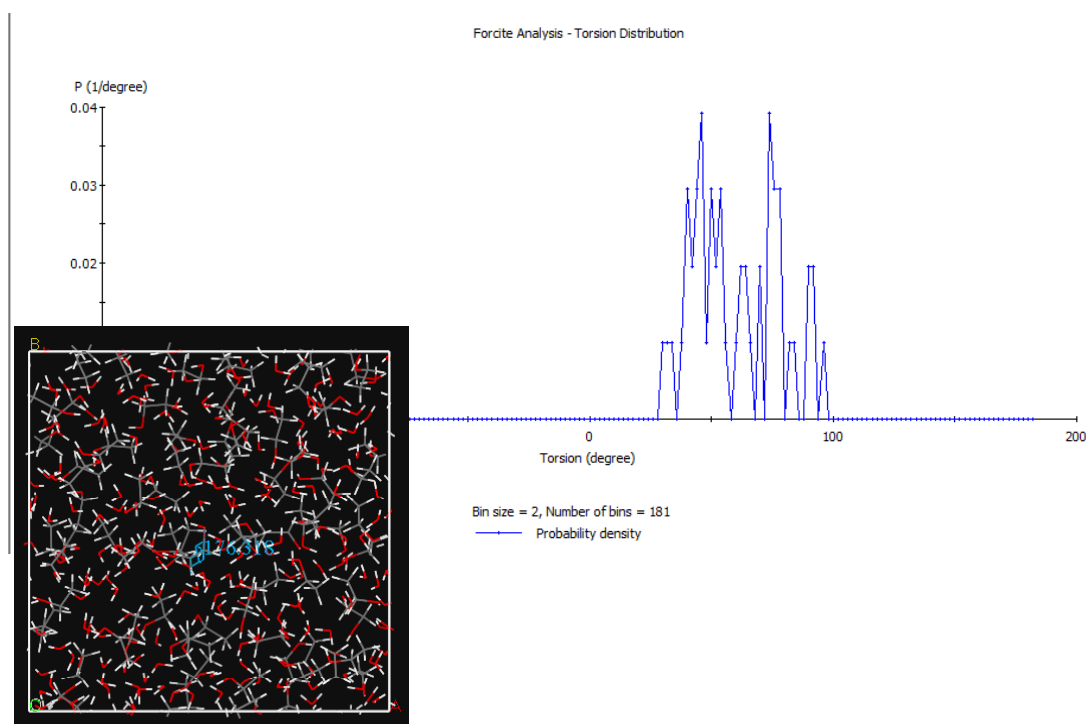
Fin31



Forcite Analysis

与结构相关的性质：Torsion distribution

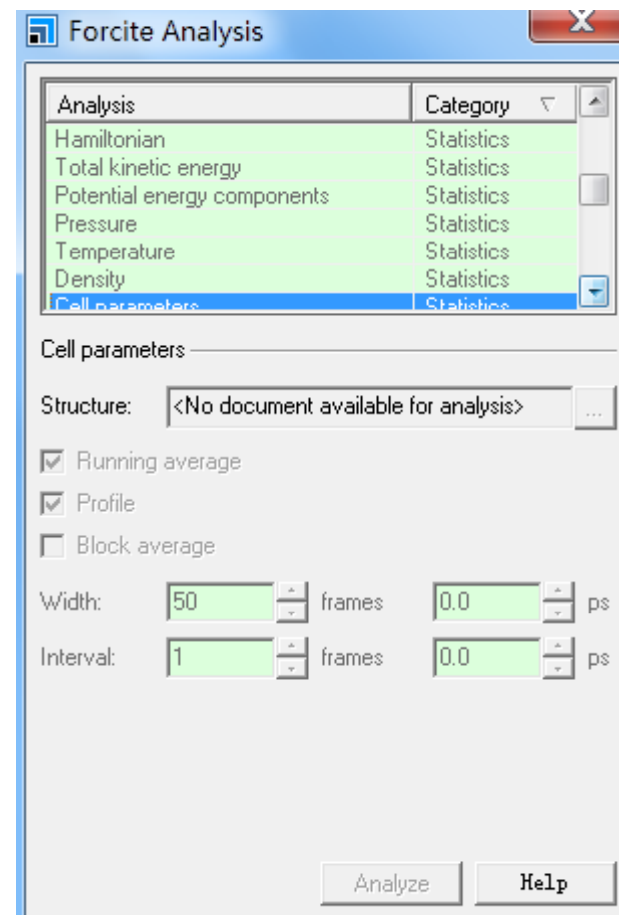
分析结构/轨迹中二面角的分布几率，分析前需首先量出需要分析的二面角。



Forcite Analysis

统计学性质：

- Hamiltonian
- Total kinetic energy
- Potential energy components
- Pressure
- Temperature
- Density
- Cell parameters

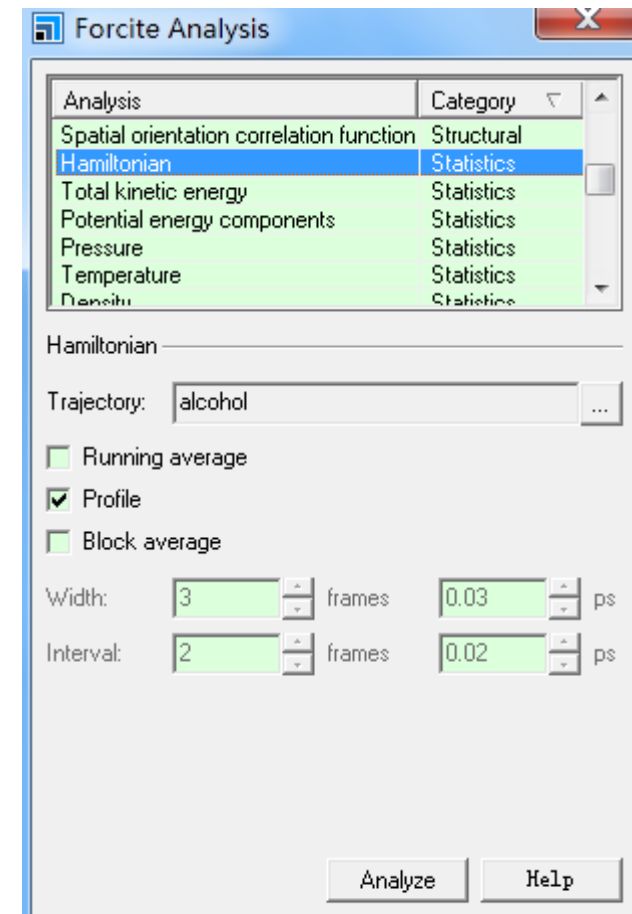


Forcite Analysis

统计学性质：[Hamiltonian](#)

分析体系的哈密顿量随模拟时间的变化

- Running average：以时间为横轴分析体系哈密顿量自第一帧至当前时间的累积平均值
- Profile：以时间为横轴分析体系的哈密顿量
- Block average：以时间为横轴分析体系哈密顿量以一定宽度和间隔的块平均
- Width、Interval：块平均计算的宽度和间隔



Forcite Analysis

NVE系综下，Hamiltonian量等于体系的总内能，应该是守恒的。

NVT系综 + Nosé控温，Hamiltonian量不再守恒，守恒的是Helmholtz自由能

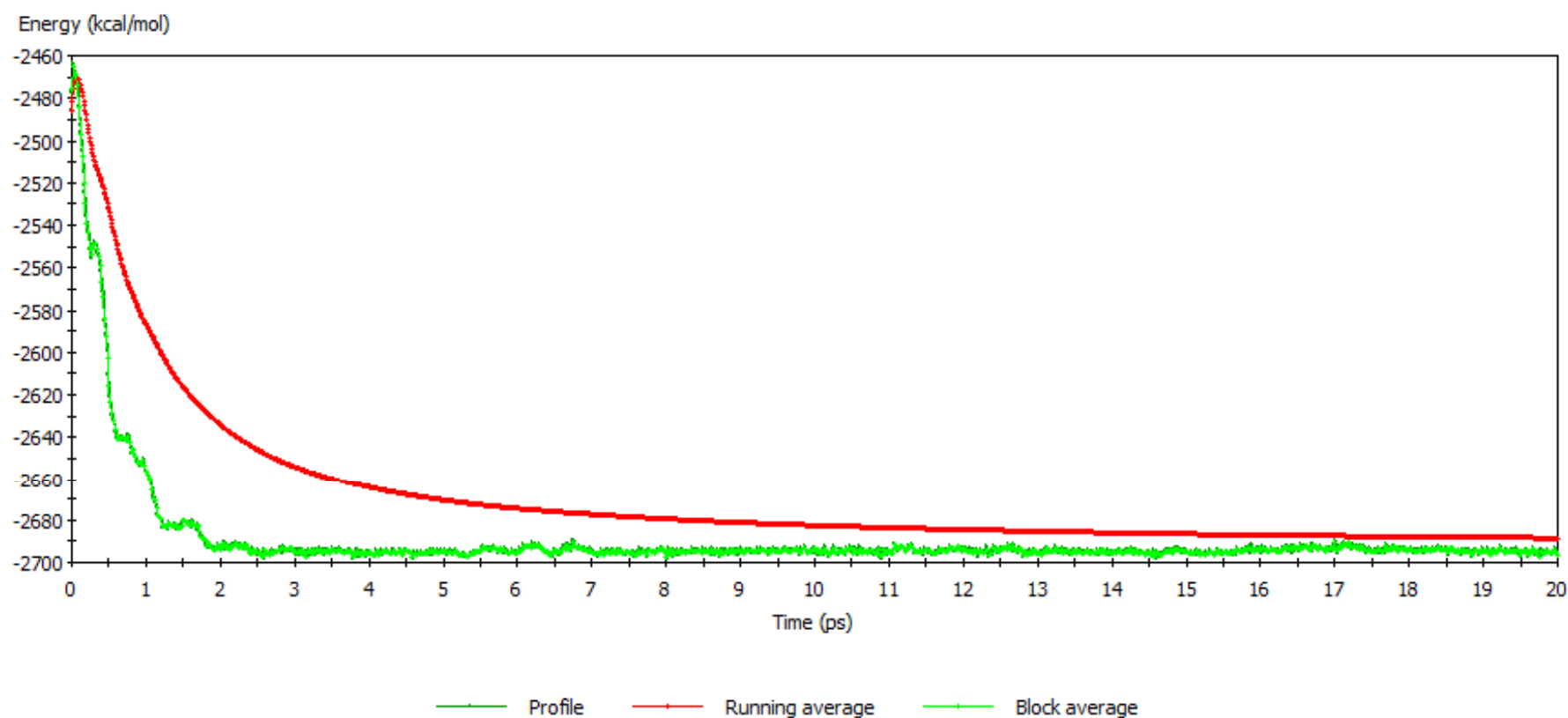
$$H_{NVT} = H_{NVE} + \frac{s^2 P_s^2}{2Q_{mass}} + \frac{N \ln s}{\beta}$$

NPH系综 + Andersen控压，守恒的是热焓

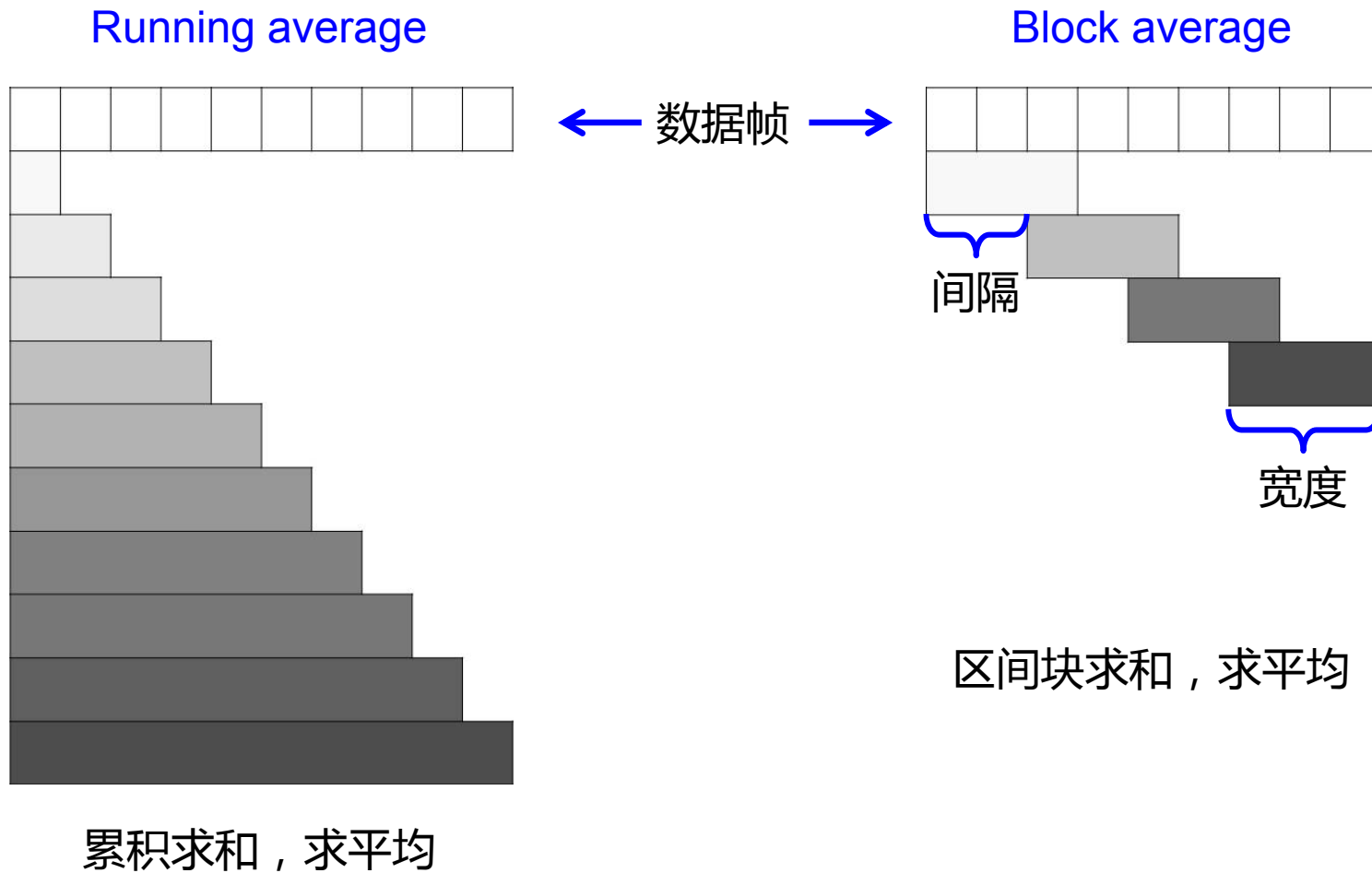
NPT系综 + Nosé控温 + Andersen控压，守恒的是Gibbs自由能

Forcite Analysis

Forcite Analysis - Hamiltonian



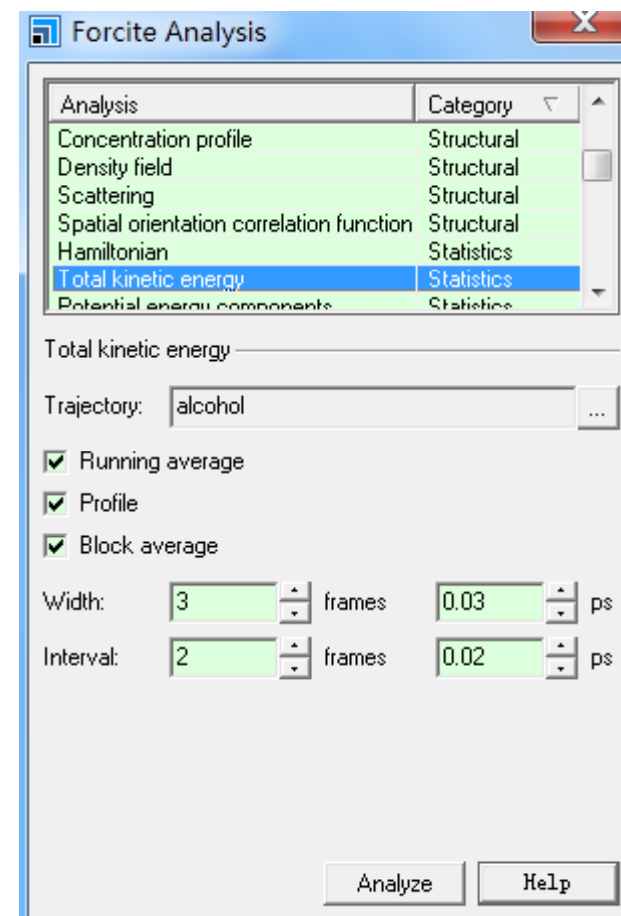
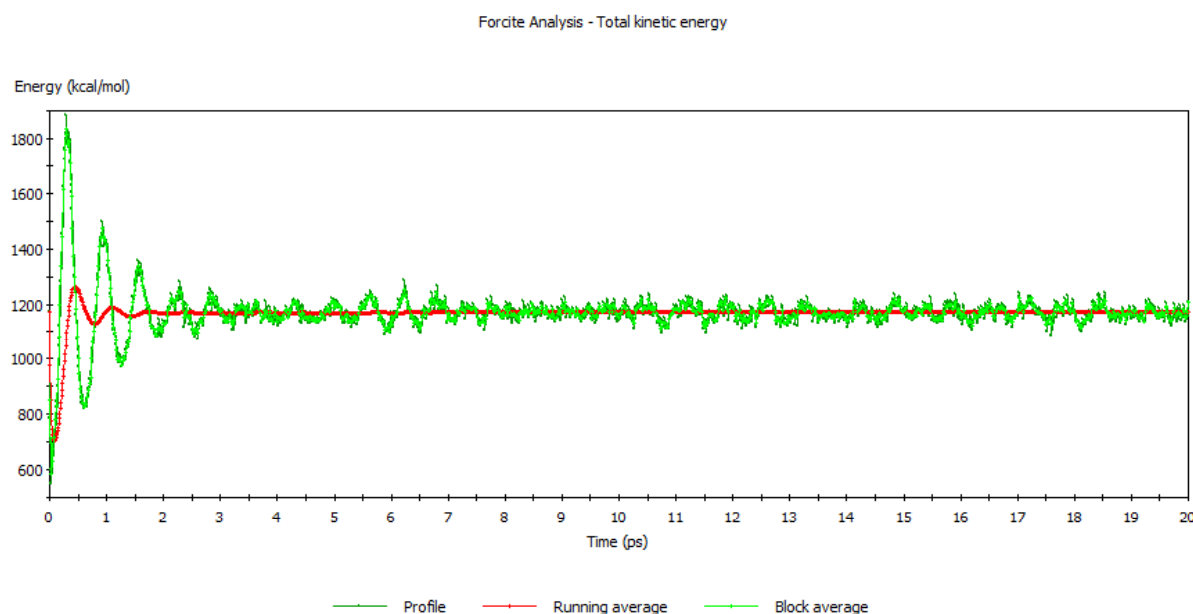
Forcite Analysis



Forcite Analysis

统计学性质：Total kinetic energy

分析体系的总动能随模拟时间的变化

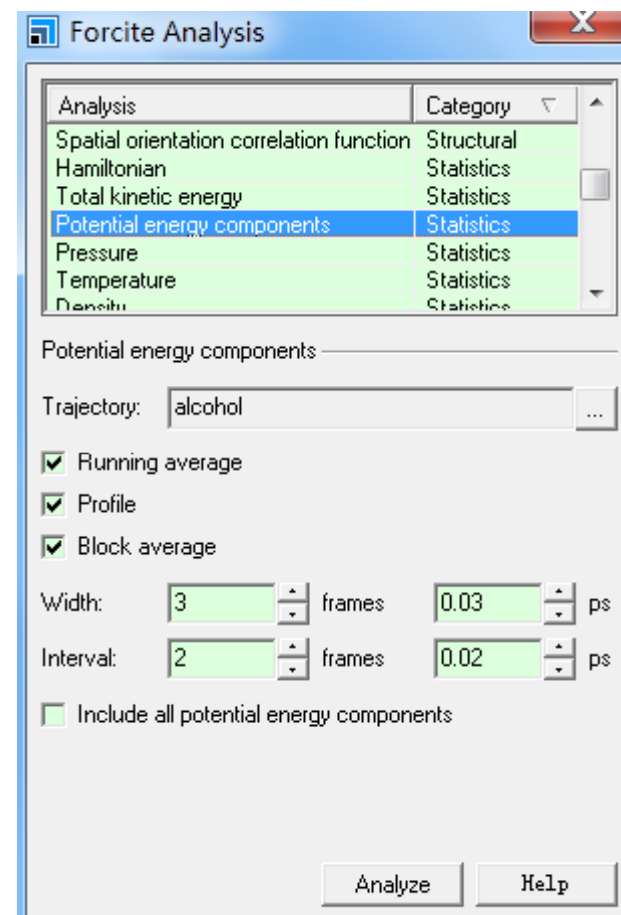
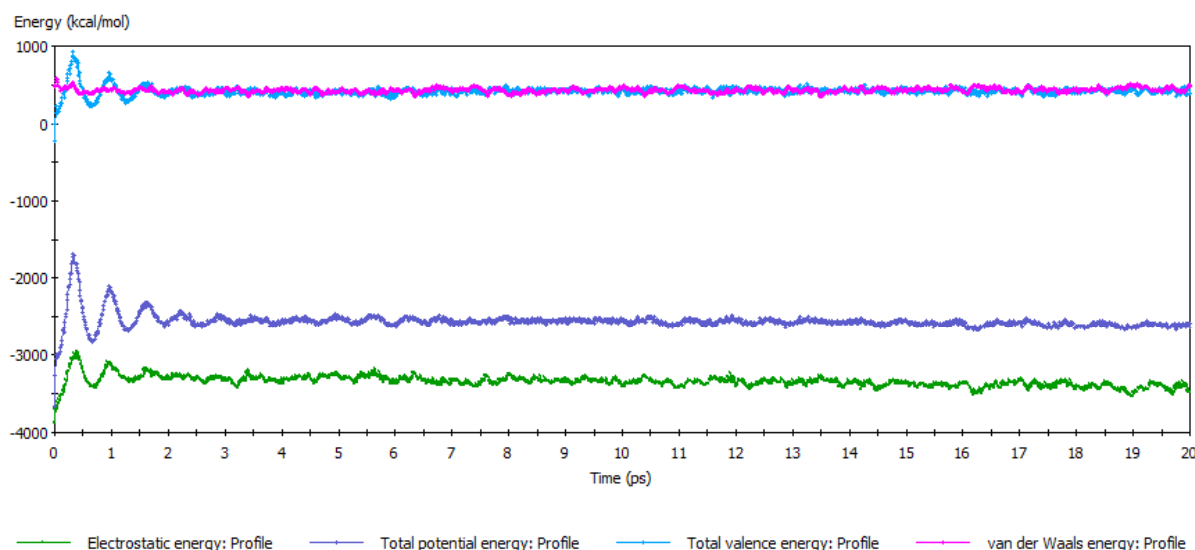


Forcite Analysis

统计学性质：Potential energy components

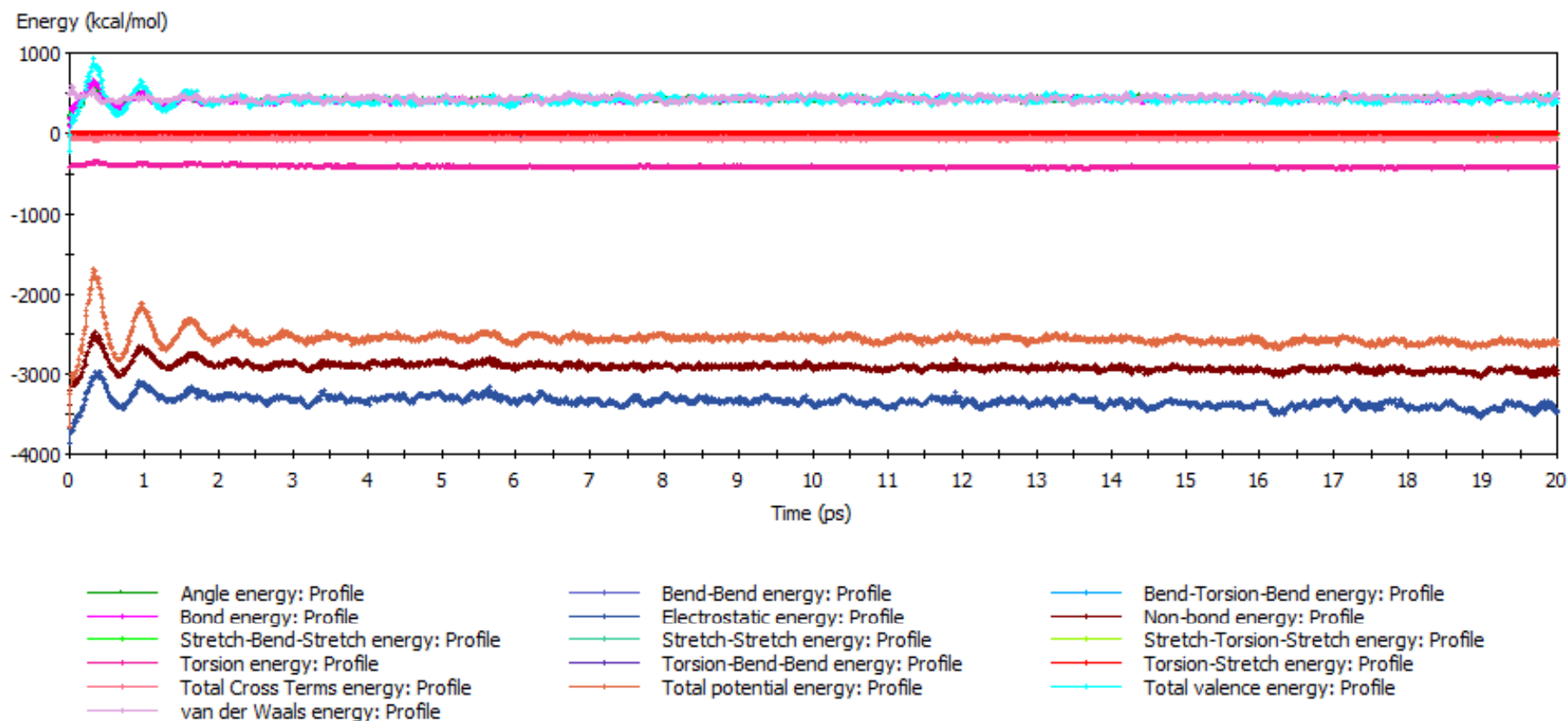
分析体系的组成势能的各组分随模拟时间的变化

- Include all potential energy components：包含所有的势能组分

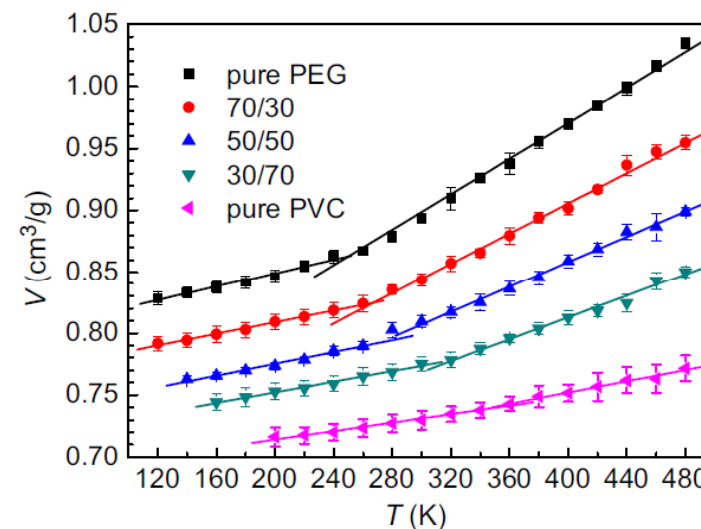
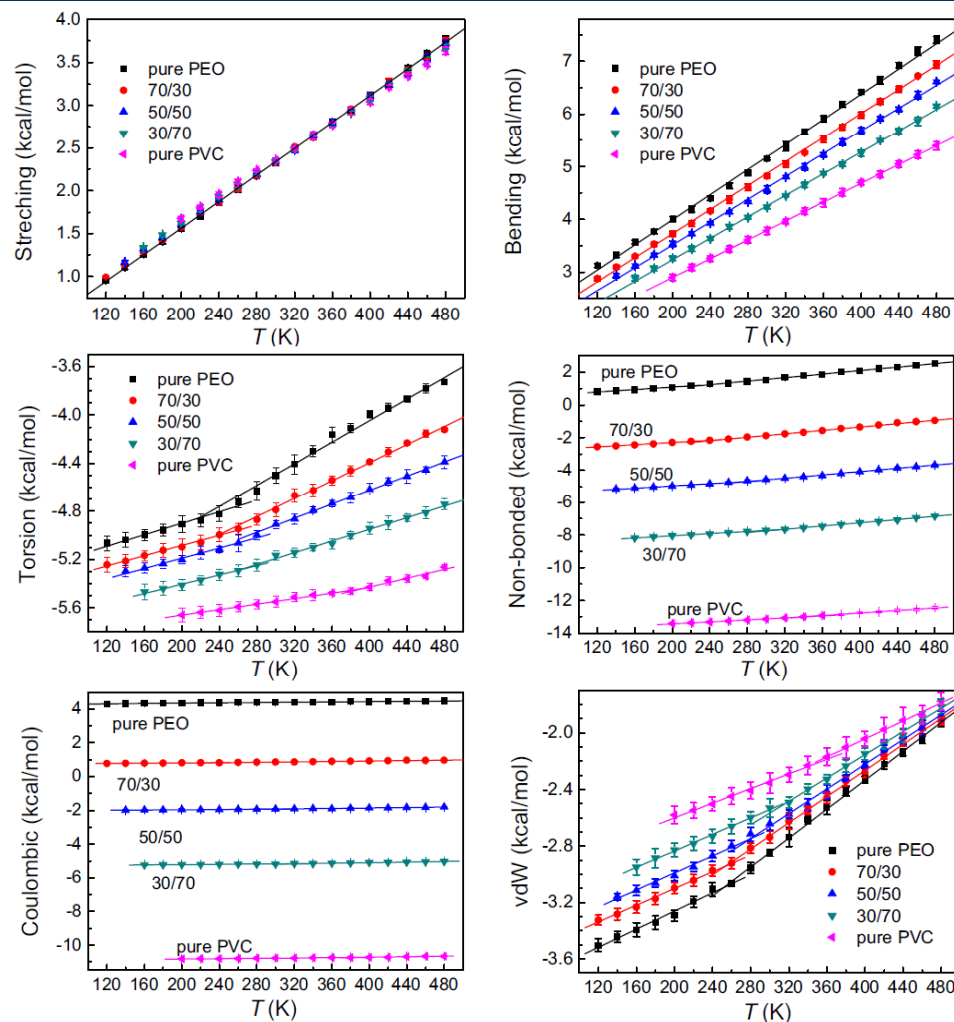


Forcite Analysis

Forcite Analysis - Potential Energy Components



Forcite Analysis



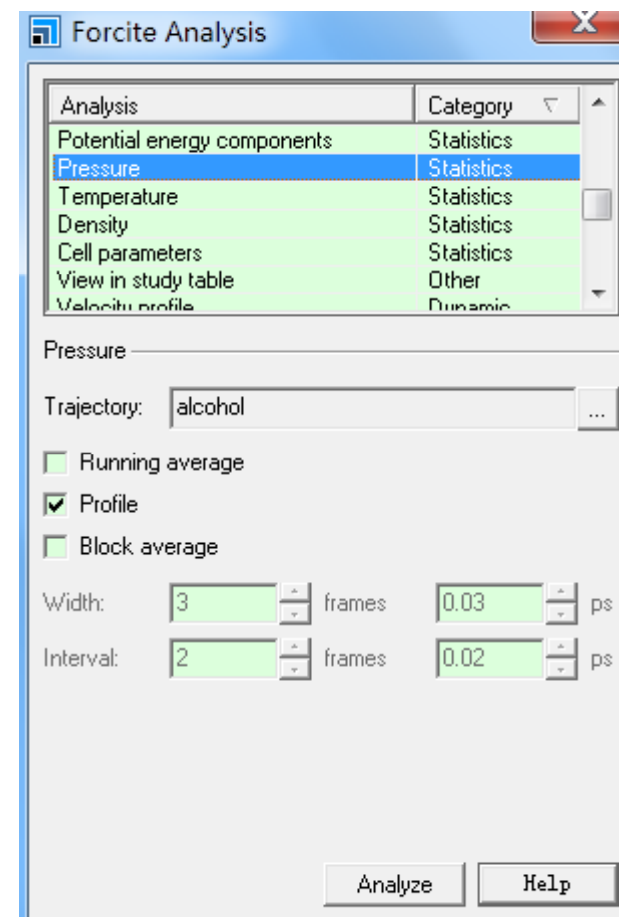
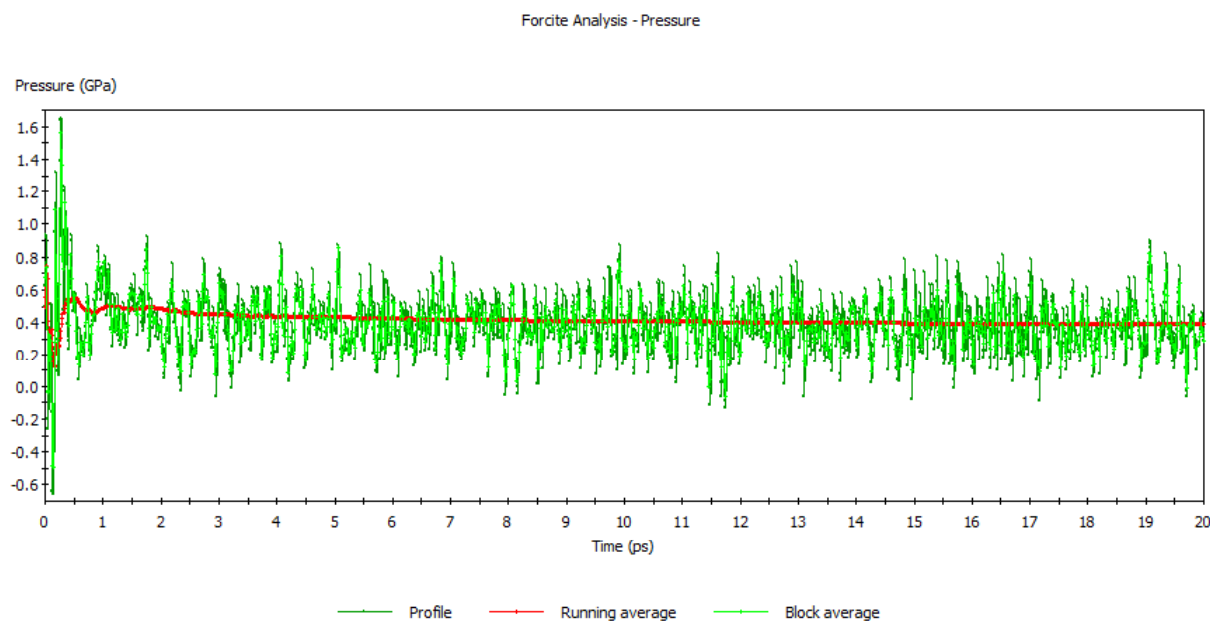
从能量组分的角度，随着温度的变化，玻璃化温度的出现主要与二面角扭转能、范德华能有关。

Polymer (2010) **51**, 291–299

Forcite Analysis

统计学性质：Pressure

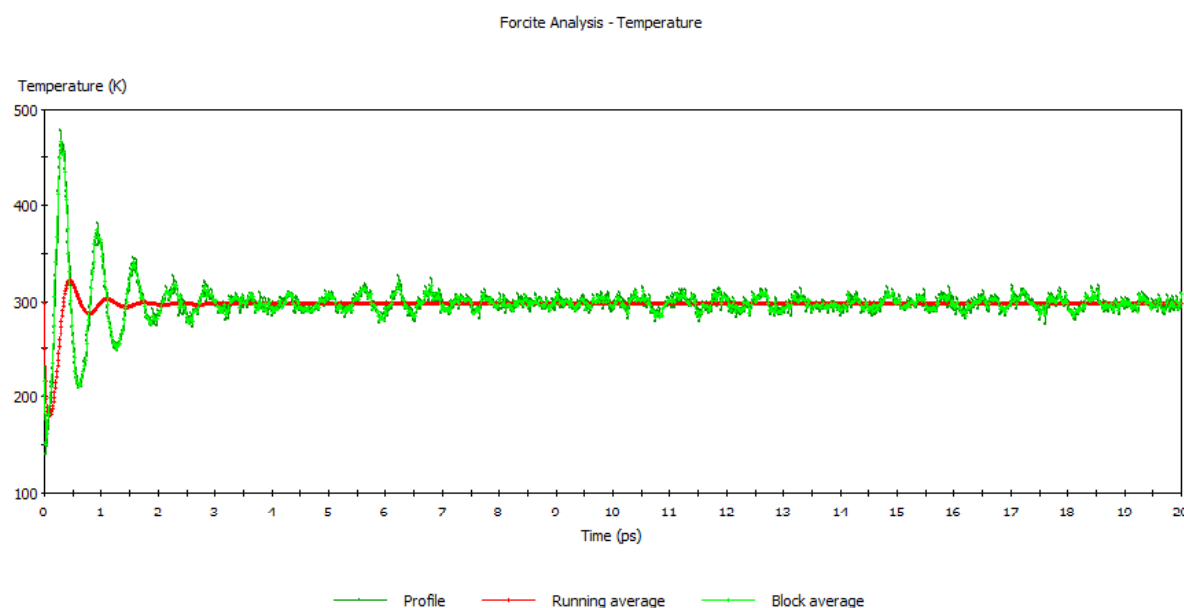
分析体系的压力随模拟时间的变化



Forcite Analysis

统计学性质：Temperature

分析体系的温度随模拟时间的变化



Forcite Analysis

Analysis	Category
Potential energy components	Statistics
Pressure	Statistics
Temperature	Statistics
Density	Statistics
Cell parameters	Statistics
View in study table	Other
Velocity profile	Dynamic

Temperature

Trajectory: alcohol

☒ Running average
☒ Profile
☒ Block average

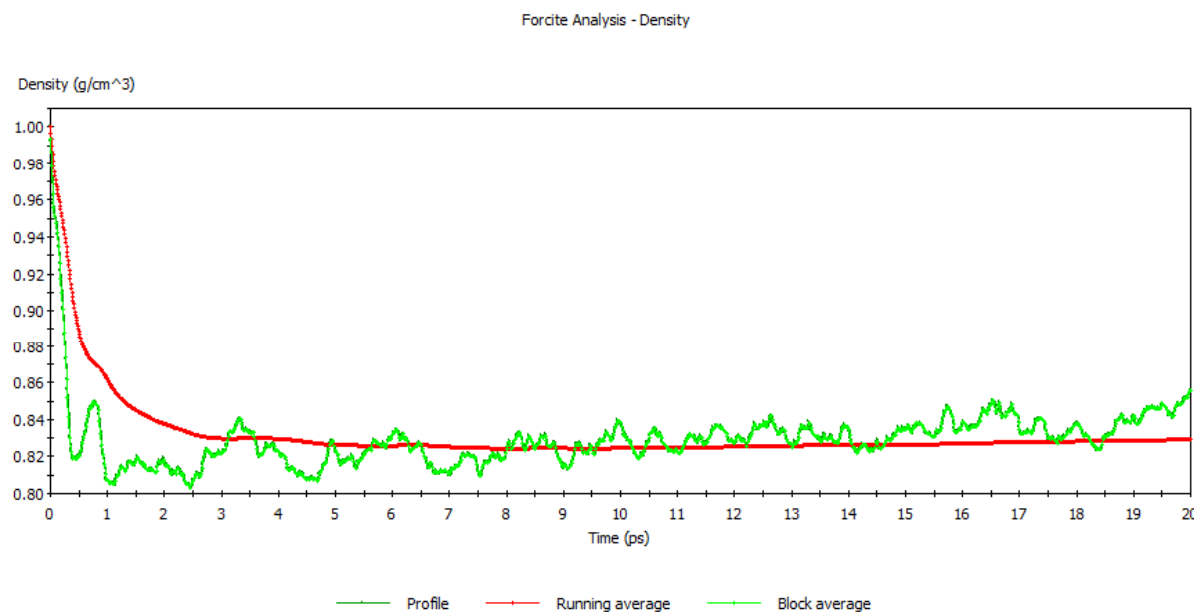
Width: 3 frames 0.03 ps
Interval: 2 frames 0.02 ps

Analyze Help

Forcite Analysis

统计学性质：Density

分析体系的密度随模拟时间的变化



Forcite Analysis

Analysis	Category
Potential energy components	Statistics
Pressure	Statistics
Temperature	Statistics
Density	Statistics
Cell parameters	Statistics
View in study table	Other
Velocity profile	Dynamic

Density

Trajectory: alcohol

☒ Running average

☒ Profile

☒ Block average

Width: 3 frames 0.03 ps

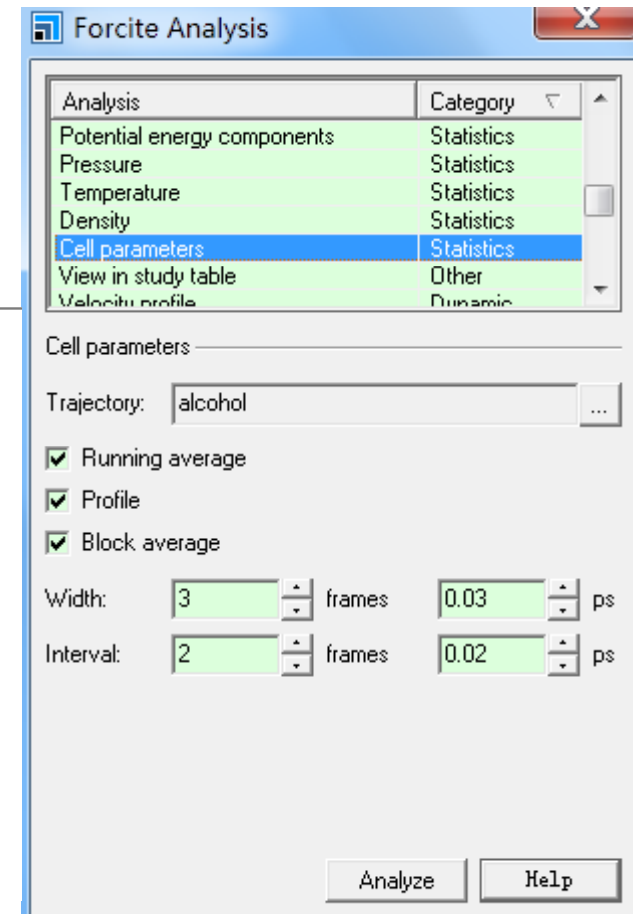
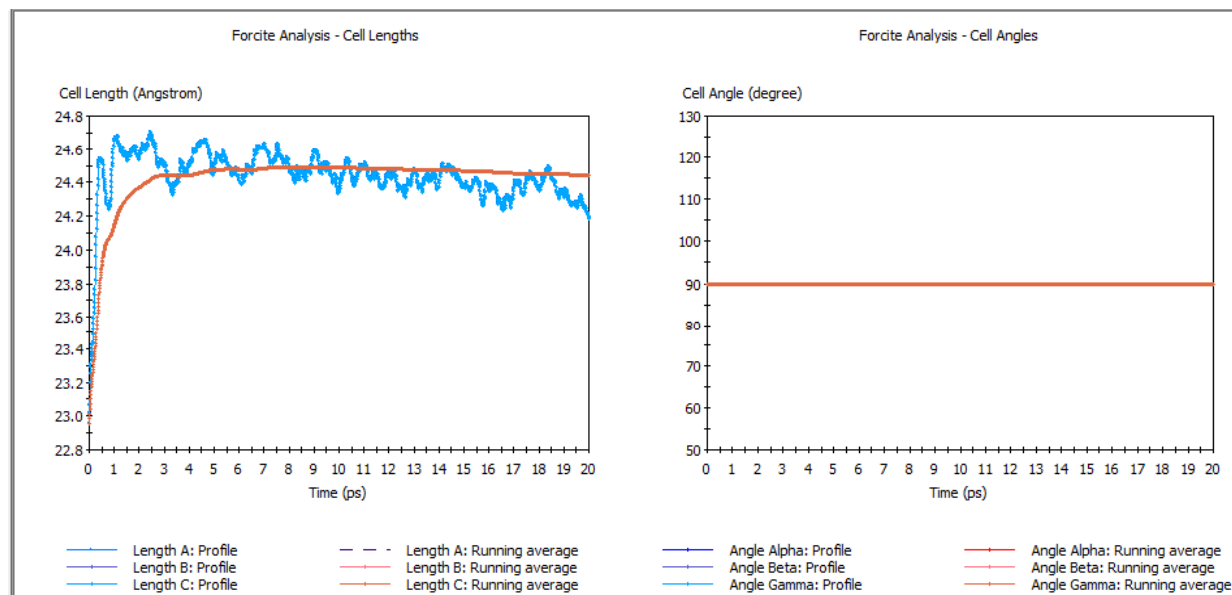
Interval: 2 frames 0.02 ps

Analyze Help

Forcite Analysis

统计学性质：Cell parameters

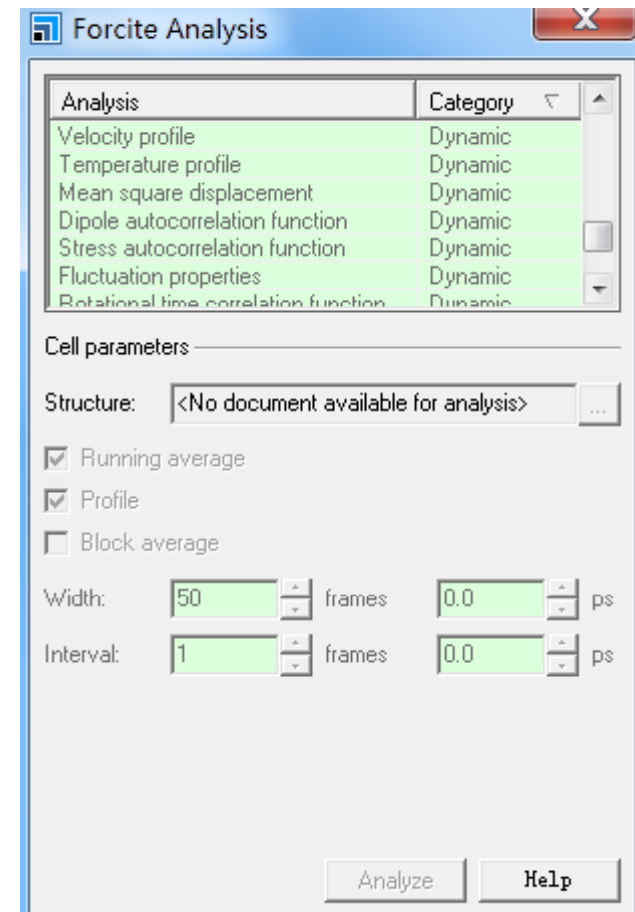
分析体系的晶格参数随模拟时间的变化



Forcite Analysis

动力学性质及其他：

- Velocity profile
- Temperature profile
- Mean square displacement
- Dipole autocorrelation function
- Stress autocorrelation function
- Fluctuation properties
- Rotational time correlation function
- Space time correlation function
- Velocity autocorrelation function
- View in a study table

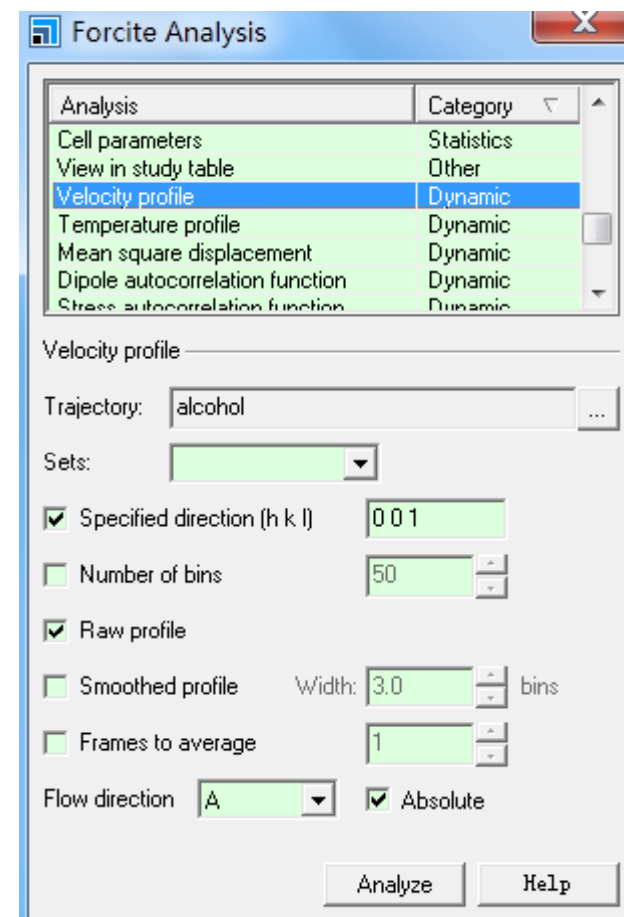
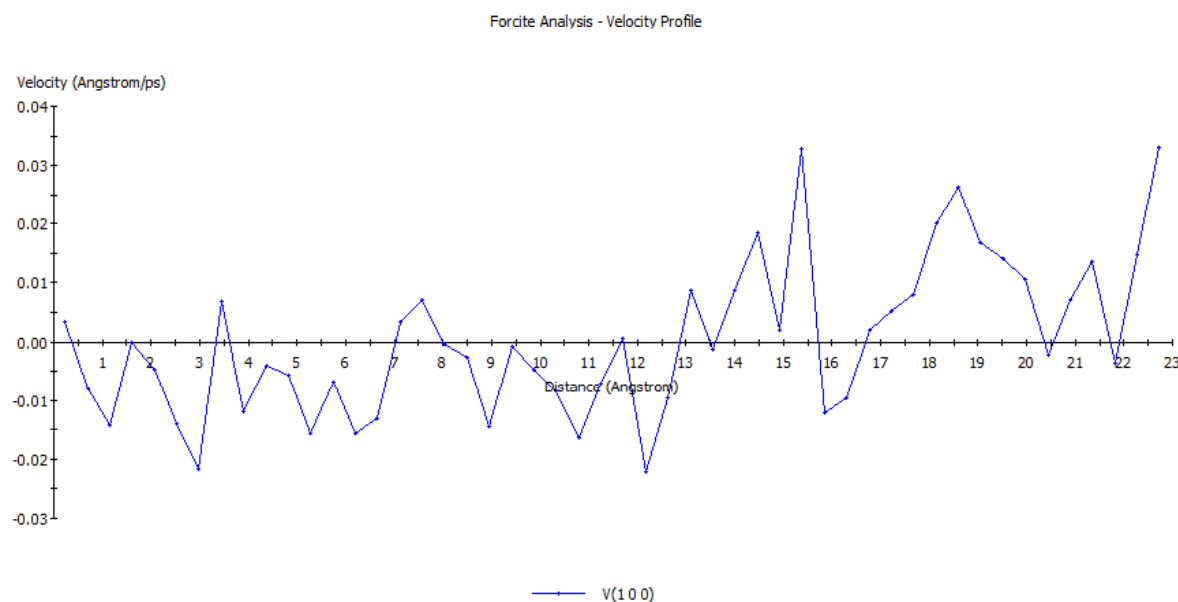


Forcite Analysis

动力学性质：Velocity profile

分析体系沿一定方向的平均速度分布

- Flow direction：分析速度在哪个方向上的分量

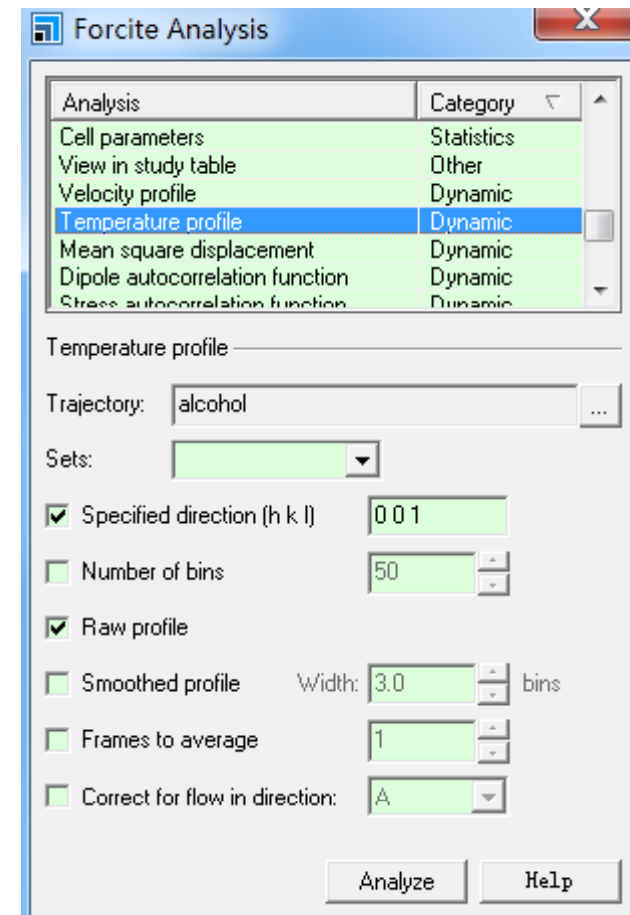
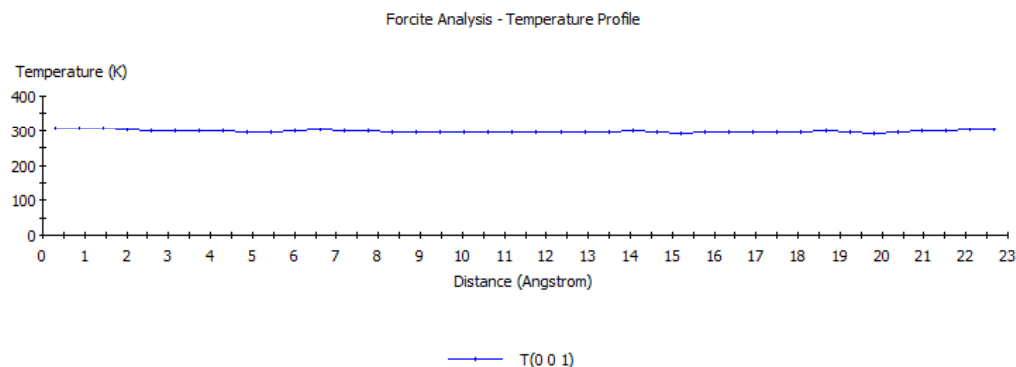


Forcite Analysis

动力学性质：Temperature profile

分析体系沿一定方向的平均温度分布，与速度分布对应

- Correct for flow in direction：若为Shear或Confined shear模拟，分析温度分布时将指定方向的流动速度排除



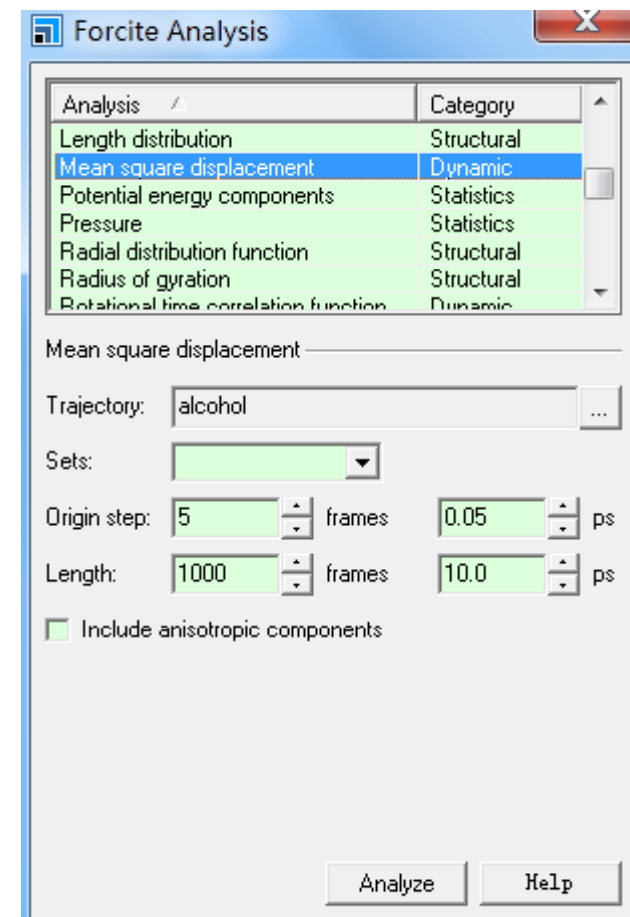
Forcite Analysis

动力学性质：Mean square displacement

分析指定set的均方位移，扩散系数

- Origin step：指定MSD计算的时间原点步长
- Length：指定MSD计算的时间域长度
- Include anisotropic components：包含各向异性的结果

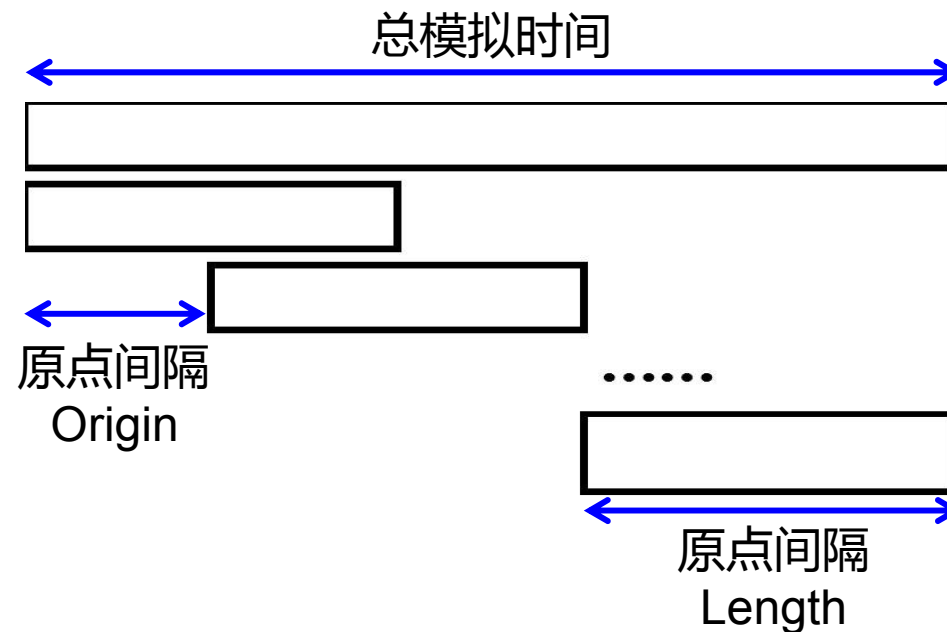
$$MSD = \sum_{i=1}^N \langle |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2 \rangle \quad D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} (MSD)$$



Forcite Analysis

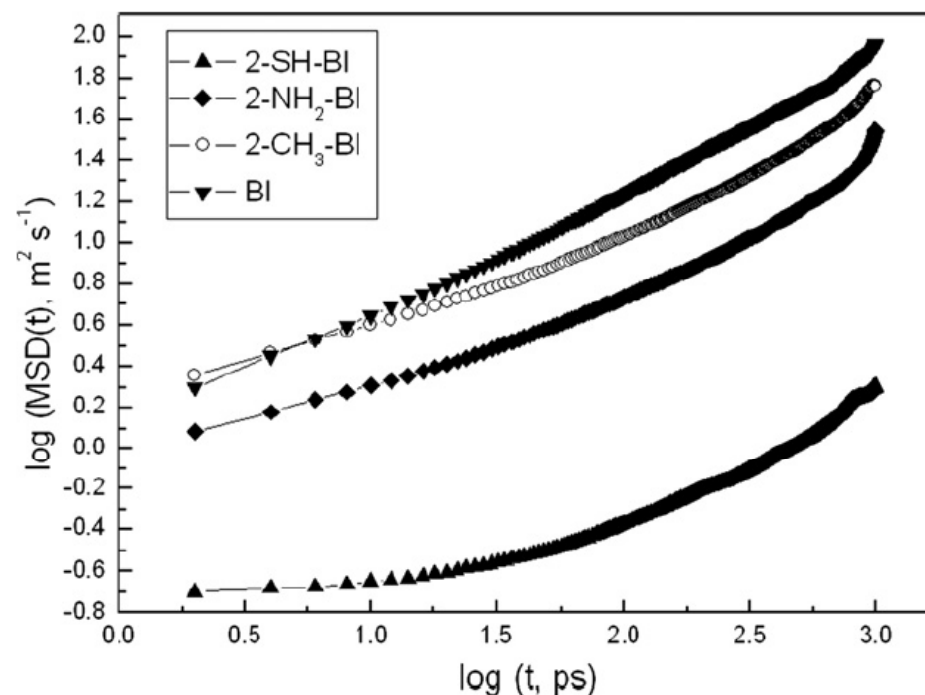
$$D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \langle |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2 \rangle$$

为了精度高的结果，最小化统计噪点，通常会采用多个时间原点的系综平均



为了有足够的统计样本，一般Length不会超过总模拟时间的一半

Forcite Analysis



计算得到水的扩散系数为 $2.419 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$ ，实验值为 $2.09 \sim 2.66 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{s}^{-1}$

横坐标的时间指的是时间间隔，意义是原子从任一时间原点起，经历一定时间间隔的平均位移。

Corrosion Science **53** (2011) 1331–1336

Forcite Analysis

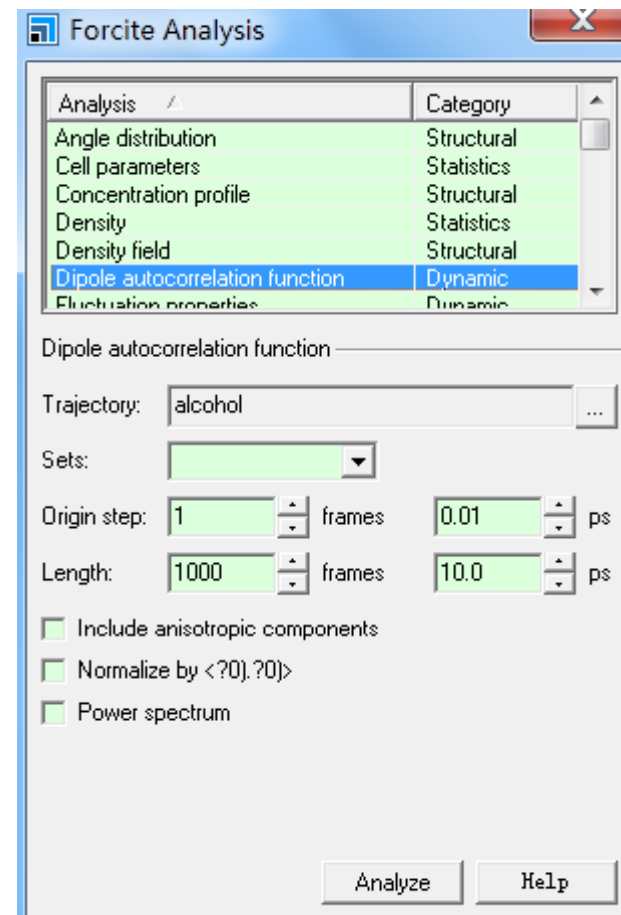
动力学性质：

Dipole autocorrelation function

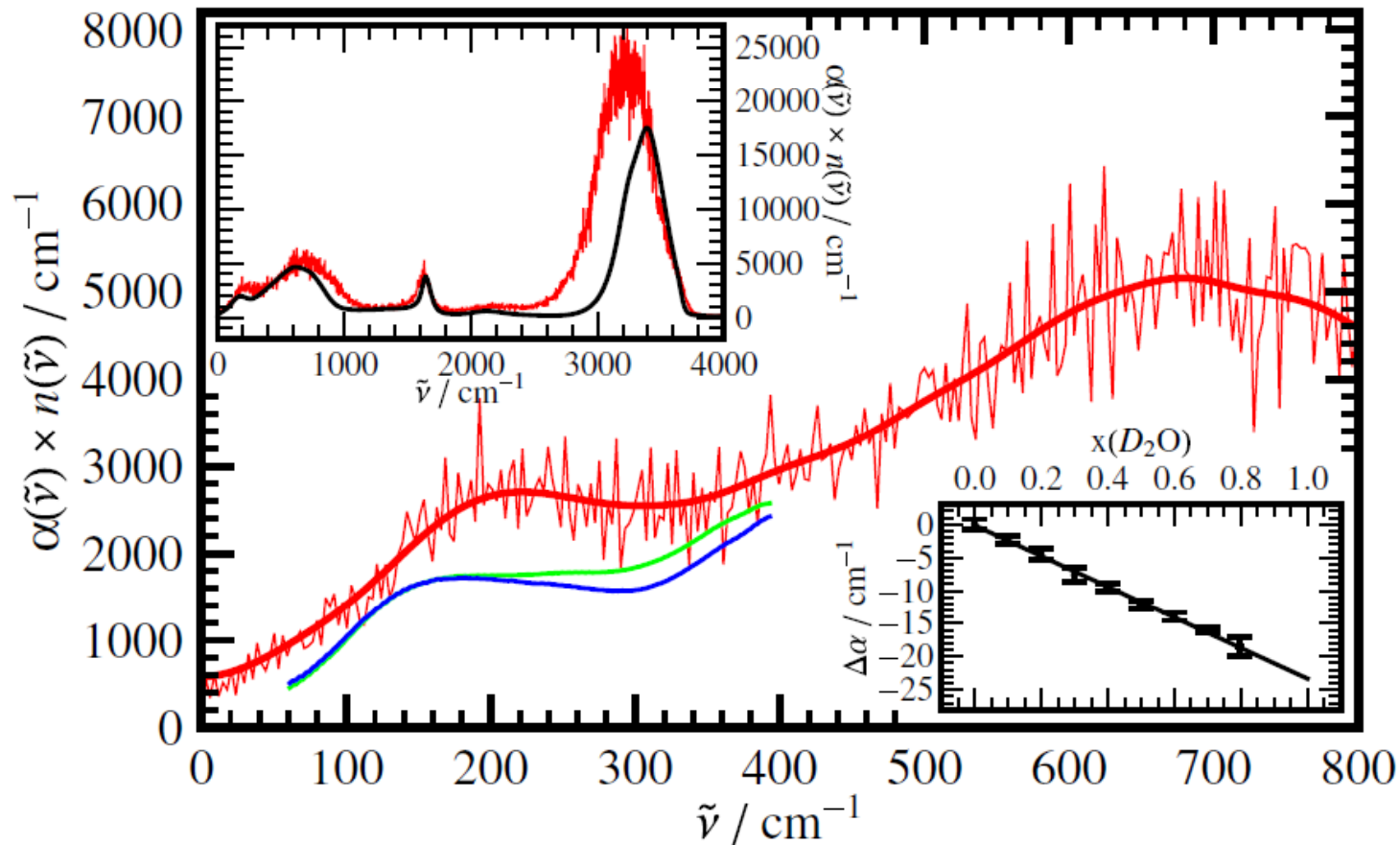
分析体系的偶极自相关函数

- Normalize by $\langle \mu(0) \cdot \mu(0) \rangle$: 将起始帧的DACF
设为1，进行归一化

功率谱，对应振动性质

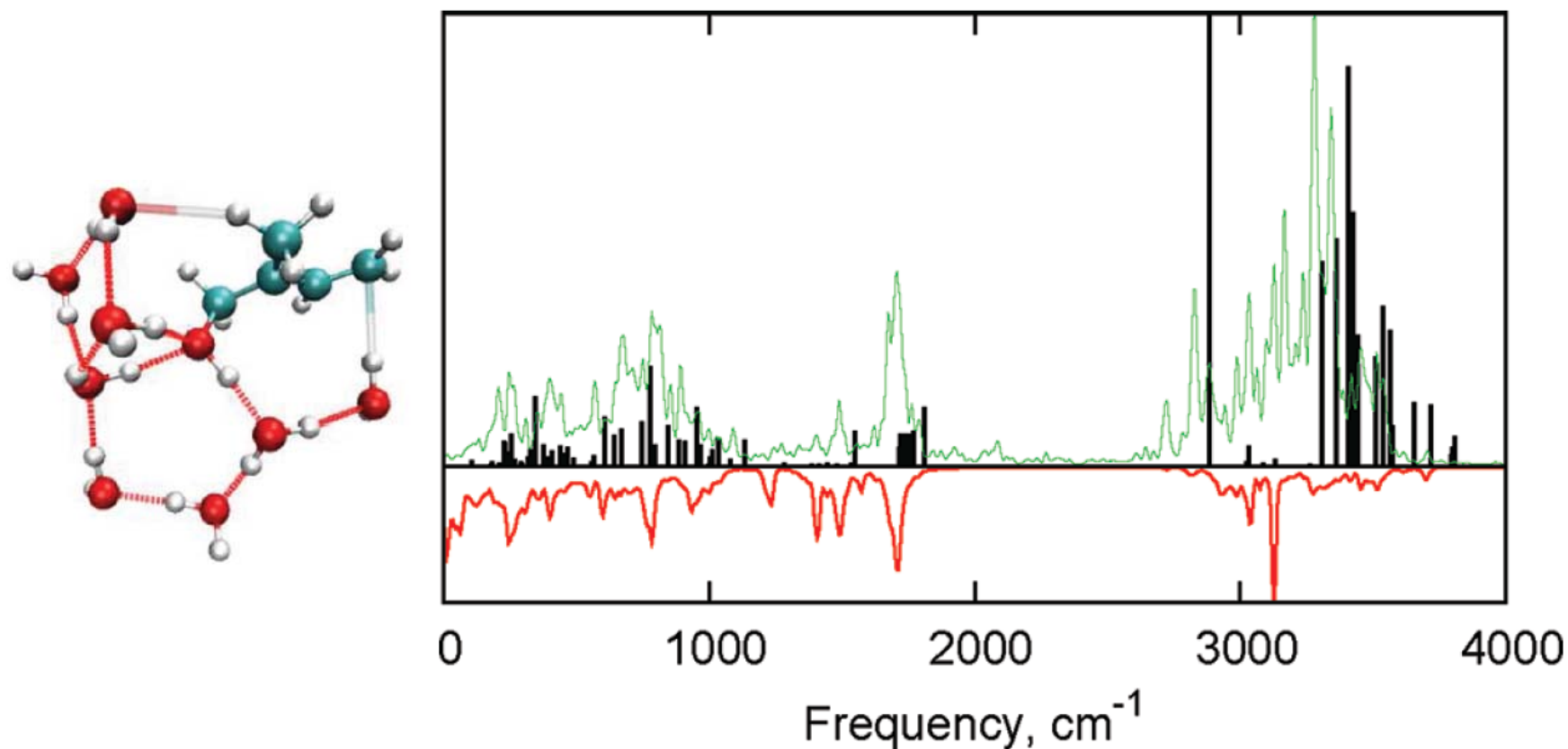


Forcite Analysis



PNAS (2010) **107**, 12068–12073

Forcite Analysis



低频区，速度自相关(红色)、偶极自相关(绿色)得到的结果与简谐近似模型下的分析一致，高频区偏差较大。

J. Phys. Chem. A 2012, **116**, 399–414

Forcite Analysis

动力学性质：

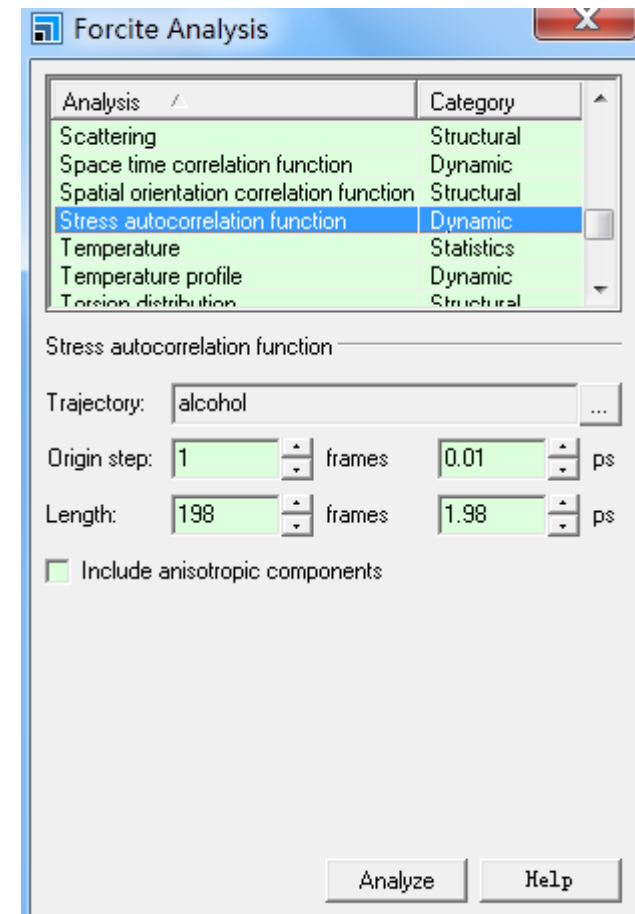
Stress autocorrelation function

分析体系的应力自相关函数

得到体系的Shear viscosity、Bulk viscosity

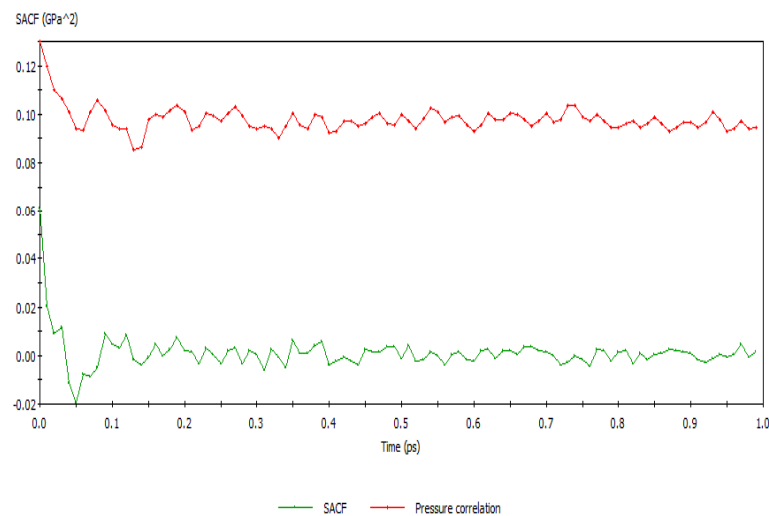
$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^{\infty} \langle P_{\alpha\beta}(t) P_{\alpha\beta}(0) \rangle dt$$

$$\eta_v = \frac{V}{k_B T} \int_0^{\infty} \langle \delta P(t) \delta P(0) \rangle dt$$

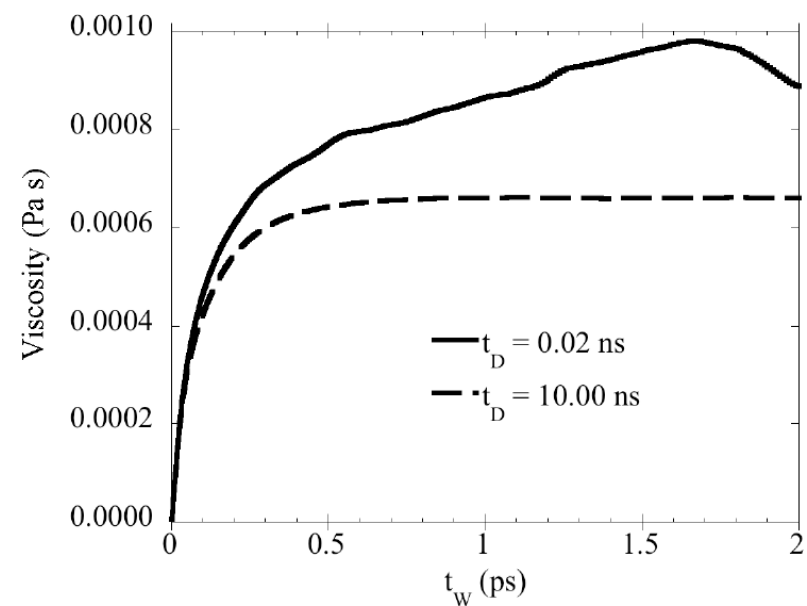


Forcite Analysis

Forcite Analysis - Stress Autocorrelation Function



Bulk viscosity	Shear viscosity
0.28360000	8.155890e-004



Molecular Simulation (2007) **33**, 1261-1266

Forcite Analysis

动力学性质：Fluctuation properties

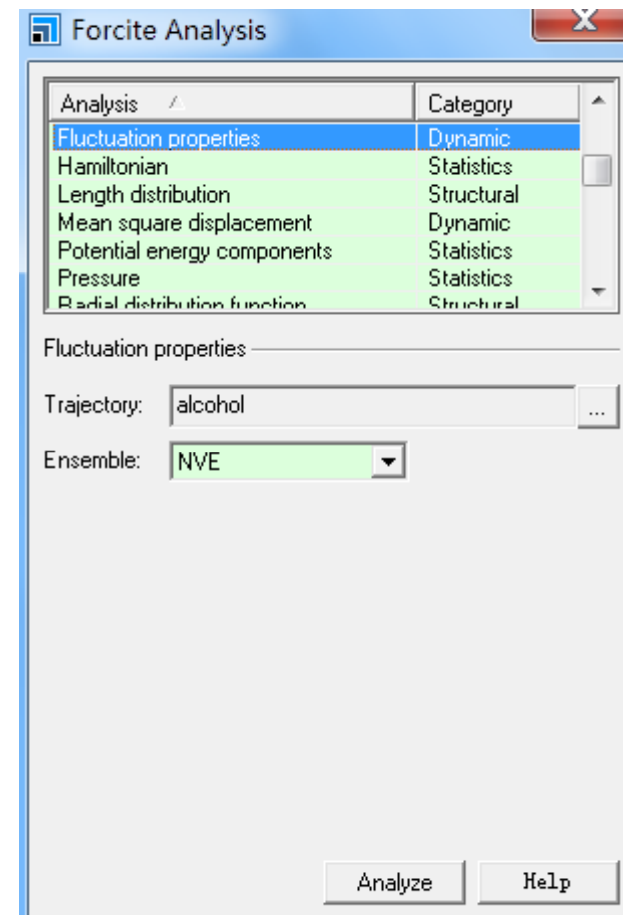
分析体系的系综涨落性质

- Ensemble：选择合适的系综，NPH, NPT, NVE or NVT，注意此处系综的选择须与计算时的系综保持一致。

某一性质的系综涨落，定义为力学性质与其系综平均的差值。 $\delta X = X - \langle X \rangle_{ens}$

一个重要的例子，等体积热容与正则系综内能的

涨落之间的关系： $\langle \delta E^2 \rangle_{NVT} = k_B T^2 C_V$



Forcite Analysis

不同的系综可能得到不同的性质，同一性质在不同系综下也可能不同的数值。

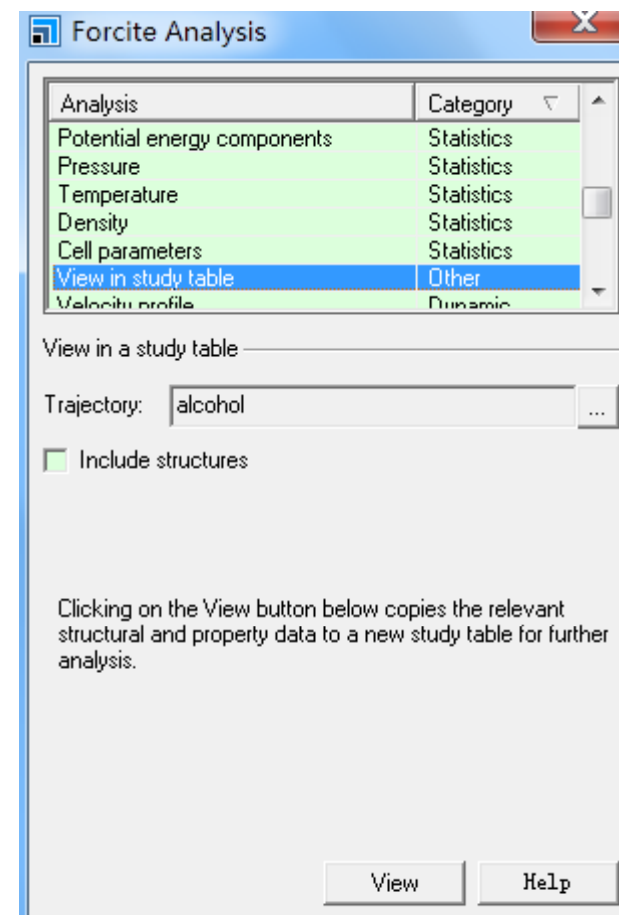
NVT、NVE	NPT、NPH
<ul style="list-style-type: none"> 等体积热容, C_V kcal mol⁻¹ K⁻¹ 热压力系数, γ_V GPa K⁻¹ 	
	<ul style="list-style-type: none"> 等压热容, C_P kcal mol⁻¹ K⁻¹ 热膨胀系数, α_P K⁻¹ 绝热压缩性, β_S GPa⁻¹ 等温压缩性, β_T GPa⁻¹ Grüneisen参数, γ 等焓焦耳汤姆逊系数, μ K GPa⁻¹ 等温焦耳汤姆逊系数, ϕ Å³ 声速, ω m s⁻¹

Forcite Analysis














其他：[View in study table](#)

将轨迹文件中选定帧的数据以study stable
的形式显示

包括：结构、帧数、时间、能量组分、压力、
温度、密度、体积、晶格常数



Forcite Analysis

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	
	Structure	Time	Frame step	Frame number	Hamiltonian	Total kinetic energy	Total potential energy	Bond energy	Angle energy	Torsion energy	van der Waals energy	Electrostatic energy	
1	 alcohol - 1	0.00000000	0	1	-2.485698e+003	1.171089e+003	-3.656786e+003	91.02724513	93.30891394	-406.44192516	485.59913565	-3.866684e+003	
2	 alcohol - 2	0.01000000	10	2	-2.477059e+003	786.17809513	-3.261311e+003	184.86910914	202.70802348	-399.79467815	493.60094582	-3.687808e+003	
3	 alcohol - 3	0.02000000	20	3	-2.464598e+003	598.41500156	-3.053760e+003	292.28127016	246.40669184	-395.91239313	543.37039207	-3.684053e+003	
4	 alcohol - 4	0.03000000	30	4	-2.463826e+003	551.90935096	-2.992552e+003	314.91918103	302.69037994	-389.54577204	585.70823767	-3.730194e+003	
5	 alcohol - 5	0.04000000	40	5	-2.468267e+003	612.87605548	-3.039128e+003	277.34162840	256.54013686	-385.83195452	571.58794009	-3.700071e+003	
6	 alcohol - 6	0.05000000	50	6	-2.469413e+003	619.53500012	-3.022475e+003	204.51093793	270.61513026	-300.62090375	533.50022043	-3.662921e+003	
7	 alcohol - 7	0.06000000	60	7	-2.468799e+003	665.09565335	-3.037307e+003	309.72033159	216.43478898	-393.00073203	504.50584288	-3.613841e+003	
8	 alcohol - 8	0.07000000	70	8	-2.468355e+003	649.83477296	-2.983604e+003	357.83827505	233.87004003	-393.64666846	489.08808289	-3.614899e+003	
9	 alcohol - 9	0.08000000	80	9	-2.471922e+003	709.52795460	-3.001743e+003	347.60887197	206.78848452	-392.38137204	472.46744522	-3.577392e+003	
10	 alcohol - 10	0.09000000	90	10	-2.472590e+003	714.13649908	-2.957402e+003	357.14839881	262.08353911	-387.78500613	470.42921615	-3.591357e+003	
11	 alcohol - 11	0.10000000	100	11	-2.476470e+003	727.11236876	-2.912552e+003	343.13978412	265.78627049	-382.28506208	458.89725563	-3.533762e+003	
12	 alcohol - 12	0.11000000	110	12	-2.483994e+003	783.88370577	-2.906396e+003	372.53678060	276.95922320	-384.81935335	435.24390452	-3.541650e+003	
13	 alcohol - 13	0.12000000	120	13	-2.492723e+003	827.25458352	-2.875915e+003	379.74807839	273.72764355	-385.17153120	444.80819314	-3.516383e+003	

Forcite Plus的参数设置

Forcefield Manager菜单

可对标准力场Dreiding进行编辑

Dreiding * Summary

DREIDING: A G...
by
S.L. Mayo, B.D. Olafson
J. Phys. Chem. 1990.

Dreiding * Types

Type	Description
Al3	aluminium
As3	arsenic
B_2	boron, sp2
B_3	boron, sp3
Br	bromine
C_1	carbon, sp1
C_11	carbon, sp1, 1 implicit hydrogen
C_2	carbon, sp2

Dreiding * Interactions

Show interaction: Bond Stretch

Fi	Fj	Functional Form	R0 / ?	K0 / kcal/mol/?^2
Filter *	*	Harmonic		
Al3	Al3	Harmonic	2.084	700
Al3	B_2	Harmonic	1.827	700
Al3	B_3	Harmonic	1.917	700
Al3	C_1	Harmonic	1.639	700
Al3	C_11	Harmonic	1.639	700
Al3	C_2	Harmonic	1.707	700
Al3	C_21	Harmonic	1.707	700

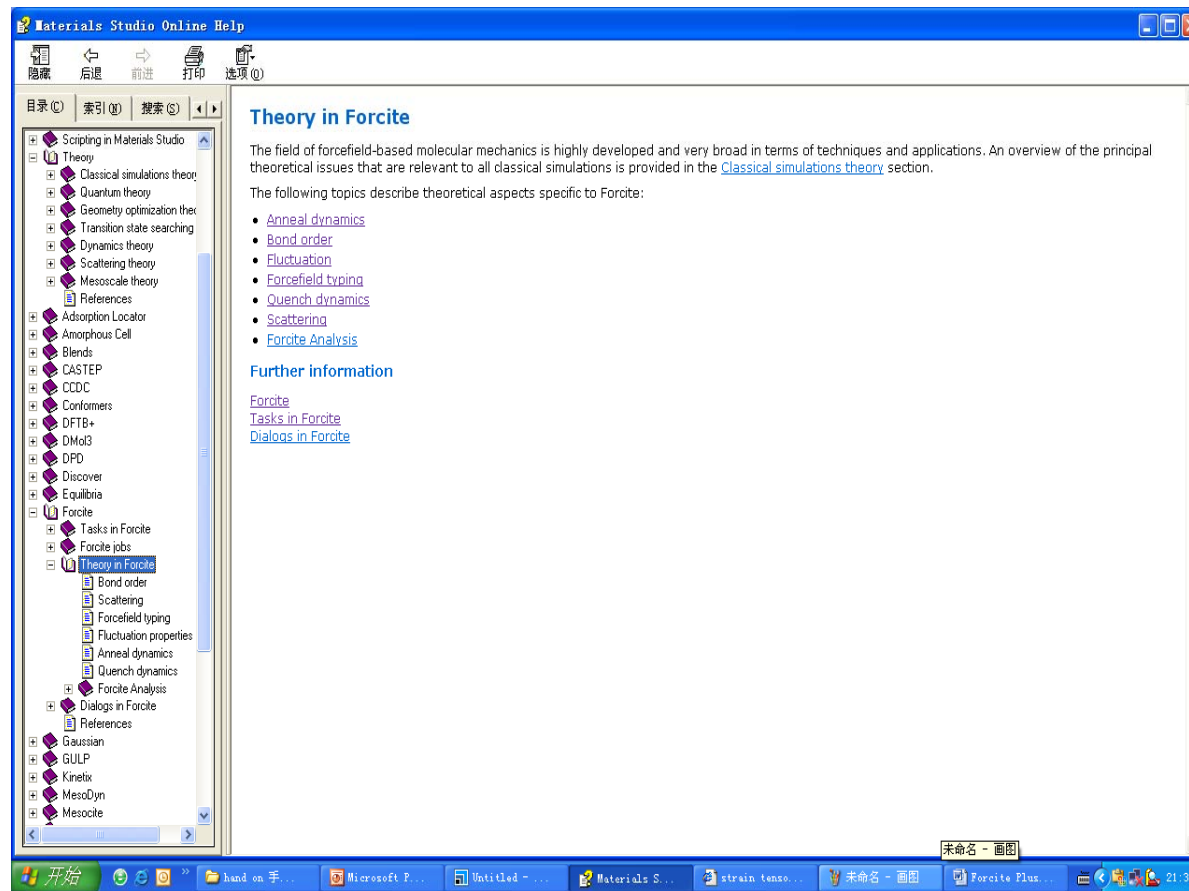
Summary描述力场的简单文本

Types描述力场的类型与特征

Interactions描述的是键合项和非键项非键相互作用

帮助文档

在线帮助文档从原理到操作再到参考文献一应俱全



我们的技术支持帐号

ms@neotrident.com

关注我们的网站

www.neotrident.com

The screenshot shows the Neotrident website interface. At the top, there is a navigation bar with links: 首页 | Pipeline Pilot论坛 | 加入我们 | 联系方式 | English. Below this is a search bar labeled 搜索创腾. The main menu includes: 关于创腾, 产品服务, 解决方案, 新闻动态, 培训中心, 文献参考, 下载专区, and 在线登记. The '培训中心' (Training Center) section is active, showing a list of training topics on the left and a '重要动态' (Important News) section on the right. A red circle highlights the '报名' (Registration) status for several topics, with a red arrow pointing from the text '报名参加各类相关的网络讲座及高级培训班' to it.

您的位置: 首页 >> 培训中心

培训主题

- 2009年12月-医药研发信息支持数据库PharmaPendium (网络系列讲座十一)
- 2009年12月-生命科学模拟技术专题系列网络讲座DS中的分子动力学
- 2009年12月-生命科学模拟技术专题系列网络讲座数据分析专题 (2)
- 2009年12月-生命科学模拟技术专题系列网络讲座生物技术专题 (4)
- 2009年11月-生命科学模拟技术专题系列网络讲座药物设计专题 (2)
- 2009年11月-医药研发信息支持数据库DG (网络系列讲座十)
- 2009年11月-生命科学模拟技术专题系列网络讲座药物设计专题 (1)

重要动态

- 2010年“医药研发信息调研平台网络系列讲座”安排
- Reaxys 新功能发布
- TCMdb中药数据库2009年修订扩充新版已经发行
- 创腾科技上海办公室迁址通知
- Discovery Studio 2.5.5版本新技术
- 2009年生命科学模拟技术专题

报名参加各类相关的网络讲座及高级培训班

A row of computer monitors on a desk, viewed from the side. The monitors are dark and have a vintage design. The desk is light-colored wood. The background is a bright blue sky with wispy white clouds. The word "train" is faintly visible in the background, overlaid on the image.

END

MS Forcite Plus