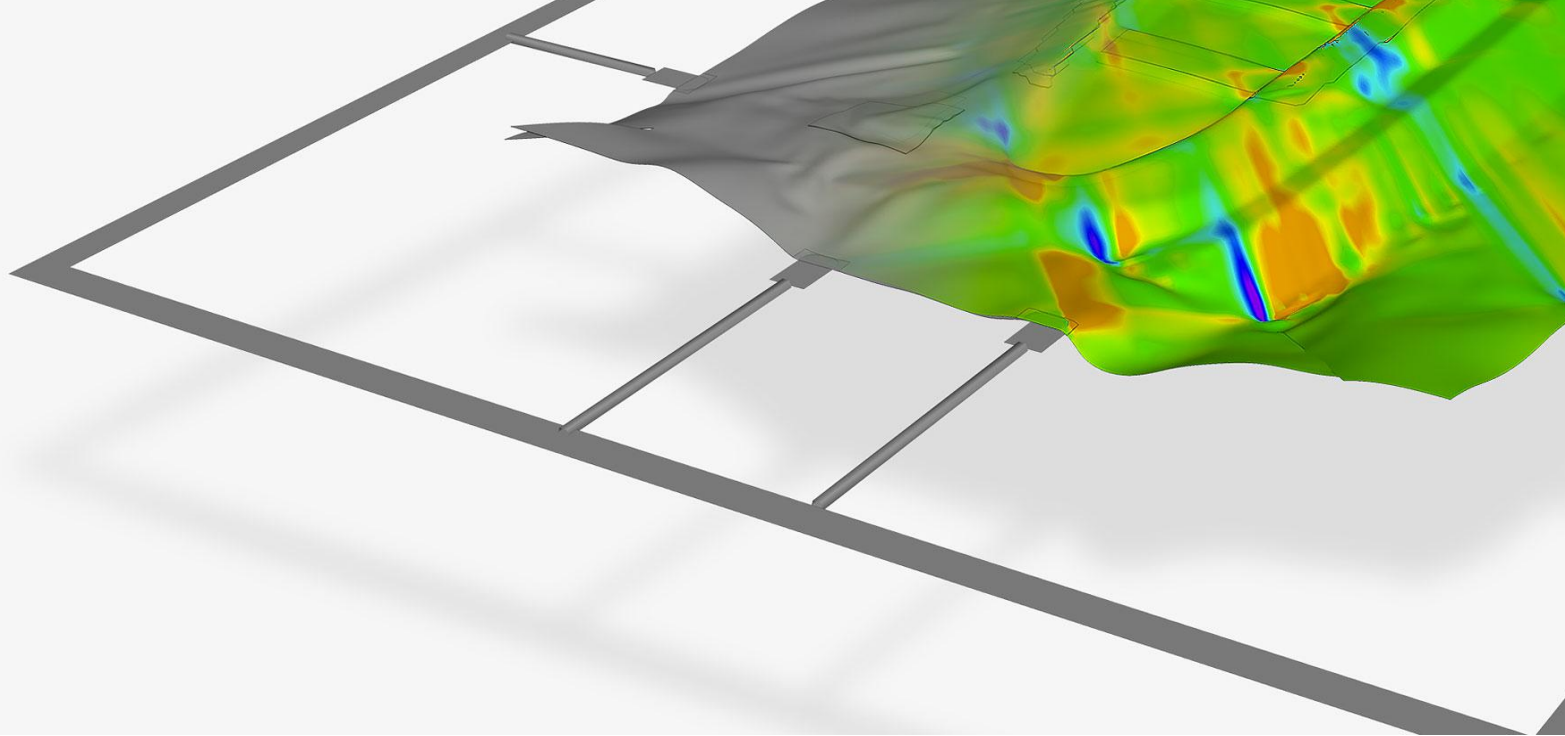
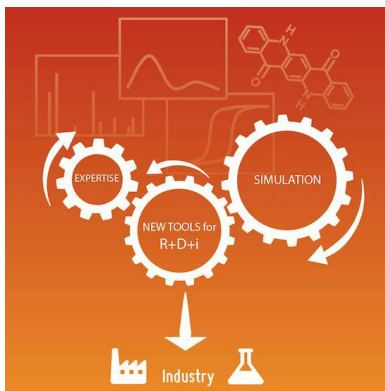




第一性原理计算软件：ASAP

编辑：赵丹



材料研究的目的：

寻找新材料或改善现有材料的性能

材料研究中遇到的问题：

要从最根本研究材料特性，就需要从第一性原理出发研究原子，原子模拟可能很复杂，并且涉及许多繁琐且困难的步骤，这就给研究人员带来了很大的阻碍。



ATOMISTIC SIMULATION ADVANCED PLATFORM

ASAP是根据第一性原理来建模并预测材料特性的通用平台

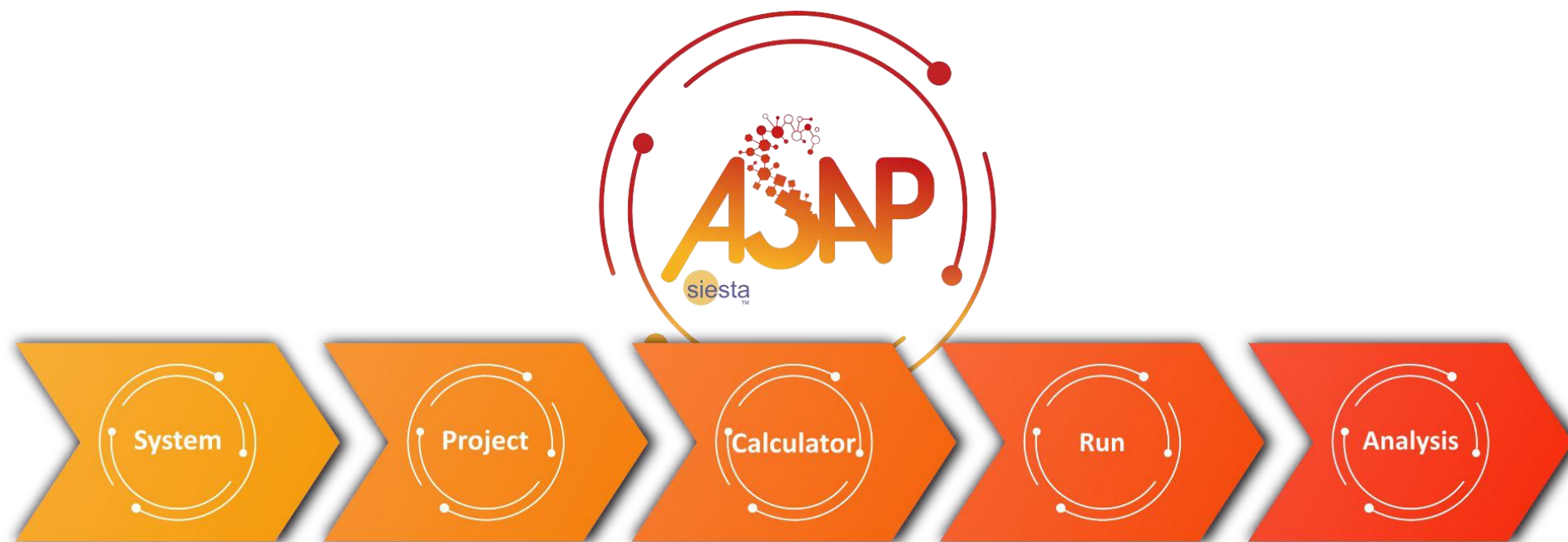
*ASAP: Atomistic Simulations Advanced Platform (高级原子模拟平台)

ASAP 产品特点

ASAP 是由SIMUNE ATOMISTICS公司开发的第一性原理计算软件，专为研究部门和工业部门提供不同级别的专业理论知识（从传统工业尖端产品所需的全量子力学说明到具有原子分辨率的大尺度建模简化）。其主要特点如下：

- ◆ 将最新的开源代码集中到一个强大的多尺度平台，目前市场是独一无二的技术；
- ◆ 模块化设计，根据不同用户需求可灵活定制；
- ◆ 自动化的即用工作流；
- ◆ 可在本地电脑或远程服务器上运行；
- ◆ 加速器，用于优化和自动化工作流程以及远程集群控制；
- ◆ 用户界面友好，适用于各种工业市场，如电子、汽车、化工、生物医药行业。





ASAP 结构建模/查看器

- ◆ 从多种文件格式导入现有结构
- ◆ 从内置分子数据库创建分子结构
- ◆ 构建最常见的晶体结构
- ◆ 建造超级电池板
- ◆ 操纵结构：添加、删除和修改原子，编辑单元
- ◆ 测量几何量
- ◆ 动态可视化：选择、旋转和平移
- ◆ 灵活的查看设置



结构

- ✓ 平衡几何 (原子弛)
- ✓ 结构稳定性
- ✓ 分子动力学*

电子

- ✓ 能带结构 (fatbands)
- ✓ 状态密度 (DOS)
- ✓ 投影态密度(PDOS)*

化学

- ✓ 弹性常数*
- ✓ 材料坚固性

热

- ✓ 热膨胀*
- ✓ 导热性*

表面

- ✓ 相互作用基板/分子
- ✓ 吸收能量
- ✓ 表面覆盖
- ✓ 分离能量

磁

- ✓ 铁磁特性
- ✓ 材料的磁性行为

传输

- ✓ 电导*
- ✓ 电阻*
- ✓ 移动*

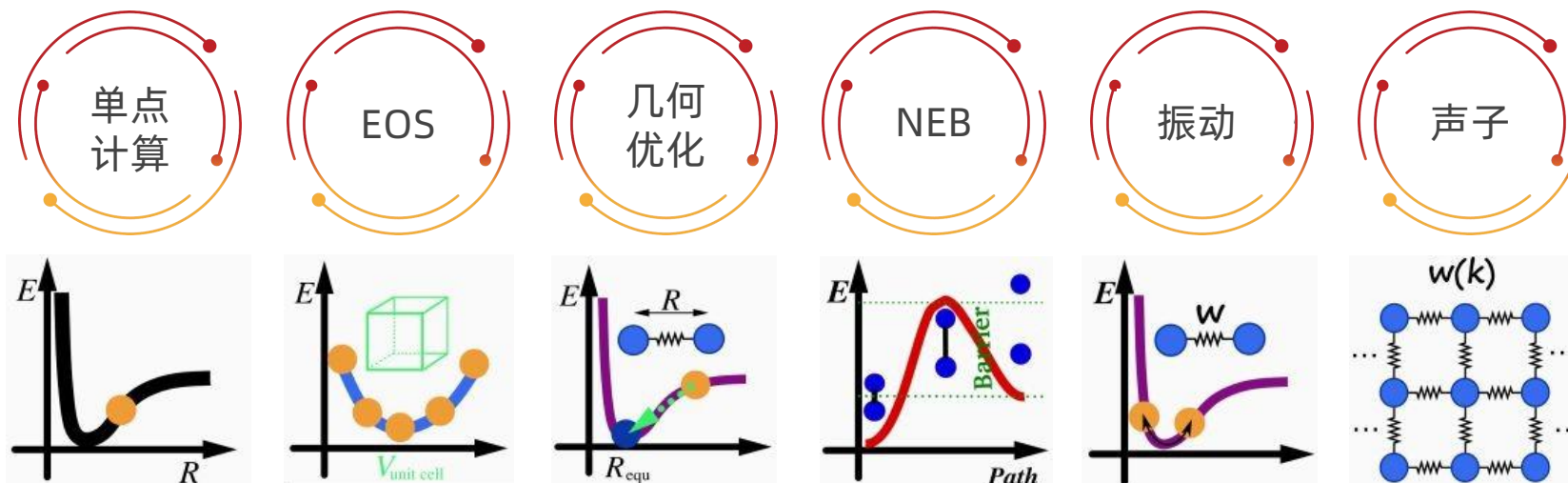
光学

- ✓ 吸收*
- ✓ 材料透明度*

ASAP 工作流

ASAP实现了如下所示的各种工作流：

- ① 单点计算；
- ② EOS(状态方程): 有助于找到固体的平衡体积和体积模量，测量材料的抗压性；
- ③ 几何优化: 计算材料的平衡几何；
- ④ NEB (Nudged elastic band)算法是一种寻找已知反应物和产物之间的最小能量路径和过渡态的方法；
- ⑤ 分子和表面的振动；
- ⑥ 研究固体振动模式的声子。



ASAP workflows

ASAP 具有模块化结构，具有专为目标行业设计的自动化工作流：

BioD：分子对接。应用领域：制药工业（药物设计）。

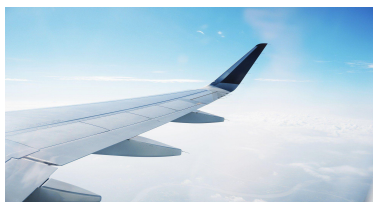
ChemR：催化过程说明和催化剂的设计。应用领域：化工、汽车和电子行业。

ElectT：纳米电子器件中的电子传输模拟。应用领域：电子行业和存储器行业。

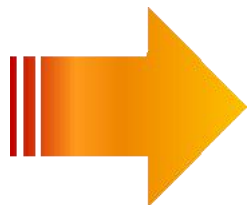
ForceD：经典力场的大尺度长期建模。应用领域：化学工程、电子、汽车工业、生物技术和制药。

ThermC：热导率和热膨胀的计算。应用领域：汽车工业、化学工程、计算机辅助工程。

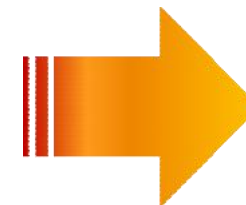
EngM：有限元法。应用领域：机械工业（质量传输、传热、流体流动、结构分析等领域）。



ASAP 提供集成的科学软件工具，用于获取各种工业应用的特性。



- 电子特性
- 电荷传输
- 机械性能
- 缺陷行为
- 表面化学



- 能源
- 汽车
- 电子
- 化学
- 生物
- 制药

ASAP 是根据第一性原理来预测材料的各种属性，无需任何先验假设，从而进一步解决工业应用部门的多物理场问题。

ASAP: 软件版本

ASAP-Pro

- 提供专业的代码，包括结构建模工具，不同的项目类型和数据分析套件

ASAP-Pro+

- 提供额外的引擎模块和软件包，可作为单独的插件
- 用于预测特定的材料属性

ASAP-Edu

- 用于教学
- 删减部分专业版功能

ASAP能为用户提供什么帮助

原子模拟可能很复杂，并且涉及许多繁琐而困难的步骤才能获得最终结果。ASAP能为用户提供以下帮助：

- ✓ 帮助用户对现有材料的特性进行优化和表征，或者对新材料进行设计和开发
- ✓ 在整个仿真阶段，指导用户正确运行材料设计仿真流程
- ✓ 保证正确使用仿真代码
- ✓ 在产品开发的早期阶段，帮助用户加快和优化材料设计流程，为用户节省成本和时间

THANKS!

谢 谢 观 赏



庭田科技，服务中国智慧研发！



官 网



微信公众号



官方微博

