

2010

恭贺新年



亲爱的用户：

北京宏剑衷心感谢您和我们一起走过了2009年！

新的一年，我们将致力为您提供更好的服务：

全国客服热线010-51261900.为您难题解惑

网站邮件咨询，沟通更方便

网站内容资讯更多，欢迎浏览！

.....

我们希望每一次的接触，都能为您带来贴心、方便和专业的服务体验。

您的满意，是我们持之以恒的奋斗目标，也是我们所有努力的最好回报！

2010年，我们依然希望与您同行！

北京宏剑公司祝您：

如虎添翼

宏运当头

迎 虎年大吉 春
HAPPY NEW YEAR
庚寅
2010





● Your attention, please!

《宏剑通讯》自 2008 年创刊以来，读者遍及全国各地超过 2000 多家的宏剑用户，并逐渐受到国内广大科研工作者的关注和认可。在此，本刊编辑代表宏剑公司对各位老师致以诚挚的谢意。

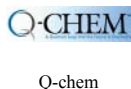
《宏剑通讯》的办刊宗旨是：为国内广大的理论科研工作者提供专业服务和交流平台。为了增进国内科研工作者的互相了解与沟通，本刊将逐渐增加以下内容：

- 1, 介绍国内理论研究实验室：将全国各地的理论研究实验室的研究领域，名学者，科研成果，软硬件条件介绍给广大读者，扩大知名度，增进相互了解。
- 2, 推荐理论研究方面的专业书籍和论文：将您的著作，包括书籍和论文，荐给广大的专业读者。在帮助广大读者增加专业知识的同时，也帮您宣传著作。
- 3, 增加信息发布平台：为您的科研发布“寻求合作信息”，为您的科研难发“知识技术交流信息”，以及任何您想与国内广大理论研究者交流的信息。

我们非常渴望能得到您的回应，将您的研究组介绍给国内广大理论科研工作者，将您的著作推荐给众多科研工作者，利用我们的平台使您和全国的业内专家进行交流。

如果您有相关方面的意愿，只需一个简单的电话或者一封邮件，我们会主动真诚的和您联系，沟通，为您提供服务是我们的荣幸。我们的联系方式见本页底部。

我们主要的软件供应与服务有以下软件：



.....

更多内容请访问我们的网站：<http://www.hongcam.com.cn/>

如果您需要咨询，购买相关软件或相关领域的技术问题，请联系我们

邮箱：sales@hongcam.com.cn 电话：+86-10-51261900 传真：+86-010-82610358

地址：北京市海淀区苏州街 18 号长远天地大厦 A2 座四层 3A09 室 邮编：100080

目录

宏剑新闻

- 2 多尺度模拟平台的建立
- 2 免费的 ATK training Workshop
- 2 ADF 参加 APS 和 ACS 的春季会议
- 2 Culgi 推出新版本 4.0.1

经验交流

- 3 好书推荐：A Chemist's Guide to Density Functional Theory
- 3 计算技巧：VASP-CASTEP 对比
- 3 计算技巧：64 位 CPU 比 32 位的快么？
- 4 国内重要课题组简介：合肥微尺度物质科学国家实验室理论与计算科学研究部

文献解析

- 4 VASP-LAMMPS 研究纳米局促水在多层硅酸盐材料中的动态行为
- 4 ADF 研究铁卟啉氮空复合
- 5 ATK 研究不同取代基的丁烷分子线的电子传输
- 6 ME 研究 SiC 和 Si₃N₄ 的溅射动态行为

最新文献

- 7 量化计算相关
- 7 材料计算相关
- 7 分子模拟相关
- 7 期刊简介

本期导读

本期推荐的好书为：A Chemist's Guide to Density Functional Theory。这本书是由一些利用计算方法解决实际化学问题的化学家写的。这就决定了这本书的背景以及您能从这本书上得到些什么，具体内容参阅本期第 3 页。

以第一性原理为基础的软件 VASP 和 CASTEP 都有什么特点，前者相对后者的优势到底在哪里？这恐怕是每个开始计算材料学研究的科研者在选择软件时都要面对的问题，具体内容详见第 3 页。

合肥微尺度物质实验室是国家级重点实验室，其中的理论和计算科学研究部国内理论研究的领军者之一，关于它的详细信息请参阅第 4 页。

和往期一样，本期选择了几篇高档次的理论相关论文进行分析（第 5-6 页），列出了部分本月内国外高档次 SCI 期刊所发表的理论研究相关的论文（第 7 页）。



北京宏剑公司
Beijing Hongcam Software Technologies Co., Ltd.

如果您想查阅以前各期 Hongcam newsletter，请登陆我们的网站下载，或直接与本刊编辑联系。

如果您对本刊的内容和定位有任何建议和意见，请直接与本刊编辑联系。

编辑：张勇 博士 邮件：support@hongcam.com.cn

多尺度模拟平台的建立

宏剑公司经过多年的发展，所代理的理论计算软件越来越多，所涉及的领域也越来越广，从高精度的从头算量化计算软件，第一性原理计算软件到半经验量化计算软件，再到经典的分子动力学模拟软件，再到介观模拟软件，最后扩展到超大规模模拟软件，已经形成了一个完整的多尺度计算机模拟平台。

利用这个平台，可以合理的处理 10^1 到 10^6 个原子组成的体系，遍及电子传输，表面吸附与催化，光化学，化学反应，热力学，新能源，太阳能电池，纳米材料，高分子材料，无机材料，磁性材料，药物设计，生物体系分子模拟，生物信息学等不同的科研方向和研究领域。

如果您有意扩展您的理论研究领域，或是将您的研究领域扩展到理论模拟领域，我们非常愿意为您送上最新编辑整理的《多尺度计算模拟软件平台应用实例》手册，并为您提供专业的免费的咨询服务。或许会发现您的某个研究领域和手册中的应用实例非常接近。我们愿意帮助您，为您提供专业的软件和服务，让您的研究手段更加丰富。

与您沟通是我们最大的乐趣，为您服务是我们最大的心愿。

免费的 ATK training Workshop 2010 年 2 月 25-26 , Stanford 大学

2010 年 2 月 25-26 日，ATK 的开发商 Quantum Wise 公司将在美国加利福尼亚州的 Stanford 大学举行一次免费的 ATK 培训。Quantum Wise 公司欢迎所有的用户和试用者参加这次培训。

这次 ATK 的培训课程主

要集中在：ATK 的背景知识和信息；利用 ATK 新界面（2009.06 和 2009.11 两个版本）的 Hands-on 教程；ATK 的进一步的开发计划；用户的问题和需求等内容。如果您有兴趣将您利用 ATK 进行的工作展示给与会者，您

可以准备一个展板或者 5 分钟的口头报告。

如果您这次不能参加在 Stanford 举行的培新，您可以在参加在 Portland 举行的 APS 三月会议上联系 ATK 的开发者，他们会在那里有一个报告。



Culgi 新版本 4.0.1 发布

2009 年 12 月，Culgi 发布了其在 Windows 和 Linux 下的最新版本 4.0.1。这个新版本修正了其 4.0.0 版本中的一些 bugs。具体改进如下：

- Improved DPD dynamics for systems containing bending and dihedral interactions in MPI
- Fixed electrostatics energy reporting in the SCMEnergy calculator
- Improved stress profile calculation in MPI for both atomistic and soft-core models
- Fixed DPD dynamics for some of the system beads or molecules at constant velocity
- Improved Culgi GPE startup behavior for non-administrator users/profile calculation in MPI for both atomistic and soft-core models

如果你使用到了涉及上述方法的功能，请您及时升级到 Culgi4.0.1。

ADF at APS and ACS 会议，2010 年 3 月

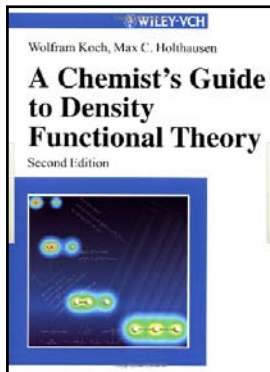
在这个春天，ADF 会在美国西海岸连续参加两个主要的学术会议。

首先，Philipsen 博士和 Kundrat 博士会在 2010 年三月于波特兰举行的美国物理学会年会上做有关 ADF 的宣传活动。与会期间，您可以在 Oregon 会议中心的 304 隔间向两位博士提出任何有关 ADF 的问题。时间为三月 15-17 日，周一到周二的 9:00am-5:00pm，周三的 9:00am-4:00pm。

在接下来的一个星期，ADF 会在于加州旧金山举行的美国化学会春季年会上有一个展台。您可以在 Moscone 中心的 322 隔间向两位博士提出任何有关 ADF 的问题，时间是 3 月 21-24 日，星期日晚上 6:00-8:30，周一周二 9:00am-5:00pm，周三 9:00am-1:00pm。

欢迎新老用户前来讨论有关 ADF2009 的最新改进。

好书推荐



A Chemist's Guide to Density Functional Theory Second Edition

Edited By
Prof. Dr. Wolfram Koch
Dr. Max C. Holthausen

Copyright © 2001 Wiley-VCH Verlag GmbH
ISBN: 3-527-30372-3 (Softcover)
3-527-60004-3 (Electronic)

编辑评价:

这本书不是由专业的理论化学家编纂的,而是由一些试图利用计算方法解决实际化学问题的化学家写的。这就决定了这本书的背景以及您能从这本书上得到些什么。

本书作者在书中分享了他对密度泛函方法从未知到应用的过程,涉及到使用密度泛函方法处理各种实际化学问题。这本书的组织形式也很简单明了:利用1-7章对密度泛函理论有关的理论背景和技术层面做了系统的介绍。对于刚刚开始使用DFT方法处理分子体系的研究者来说是个不错的入门,前提是读者多少有一点量子化学的基础。利用8-13章介绍了当今可实现的条件下(包括软件和硬件),利用密度泛函理论可以解决那些领域的问题,并介绍了一些具体的算例。这对于那些想把计算方法直接和实验相结合的科研人员来说是很有实用价值的。

本书的主体部分一共只有265页,可以称的上短小精悍。通过上述两部分的阅读,读者不但可以了解密度泛函理论在多方面的应用,也能知道该方法的一些限制。

这本书主要是写给以研究分子体系为目的的化学家的,没有涉及现在流行的利用DFT方法研究周期性的固体体系。所以如果您所在的领域需要使用诸如VASP, CASTEP 之类的软件的话,这本书可能不能给您太多直接的帮助。请读者在决定参阅本书之前确定自己的目的,这样才能事半功倍。

本书主要内容:

Part A: The Definition of the Model

1. Elementary Quantum Chemistry
2. Electron Density and Hole Functionals
3. The Electron Density as Basic Variable: Early Attempts
4. The Hohenberg-Kohn Theorems
5. The Kohn-Sham Approach
6. The Quest for Approximate Exchange-Correlation Functionals
7. The Basic Machinery of Density Functional Programs

Part B: The Performance of the Model

8. Molecular Structures and Vibrational Frequencies
9. Relative Energies and Thermochemistry
10. Electric Properties
11. Magnetic Properties
12. Hydrogen Bonds and Weakly Bound Systems
13. Chemical Reactivity: Exploration of Potential Energy Surfaces

计算技巧

VASP 还是 CASTEP, 这是个问题?

恐怕每个从事计算材料学的科研人员都会遇到这个问题。有些同学会不加犹豫说 VASP 比较好,但继续问下去,也就不知道 VASP 究竟哪里比 CASTEP 要好一些了。下面我们就来比较一下两个软件的特点:

二者系出同源, VASP 的前身是 CATEP, 因此相对于 CASTEP 做了很多卓有成效的改进, 所以二者的基本的原理差不多, 有些算法略有差别。

Castep: PW + Norm conserving PP or Ultrasoft PP

Vasp: PW + Ultrasoft PP or PAW potential

- 1, vasp 的 pseudopotential 库要比 castep 的完整。
- 2, 计算磁性方面: vasp 能处理好几种特殊的情况, 比如: Non-collinear calculations and spin orbit coupling, 比 castep 的好一些。Vasp 实现了 L(S)DA+U 或 GGA+U, 而目前 castep 的 LDA+U 还只能对特定体系进行优化, 对于多数体系只能计算单点能。
- 3, MD 方面: vasp 和 castep 都是 BOMD, CPMD 方法是 CPMD, BOMD 处理金属好一些, CPMD 对金属不太好。vasp 在这方面的效率要比 castep 高一些。
- 4, 算法方面: vasp 可调参数比较多, 跟更有利于使用者对不同计算的控制。另外, VASP 支持的展宽算法和自洽迭代算法种类比 CASTEP 所提供的多, 非常的实用。
- 5, 计算速度: 相同硬件条件下, vasp 计算速度较 castep 快, 并行方便且效率高。另外在性价比方面, vasp 比 castep 要好一个层次。castep 每增加一个 cpu 都需要钱, vasp 则没有这个费用。
- 6, 二者都有 Windows 下的图形化界面, 用以建模, 设定计算参数, 分析计算结果等。Vasp 实现在 Medea 中, 而 Castep 实现在 Material Studio 中, 二者在此方面的功能相似。值得一提的是 Medea 中集成了众多实用的晶体数据库: ICSD, PFB, NCD, PCD 等。
- 7, Castep 能计算声子色散曲线, 但是只能采用 Norm conserving PP。vasp 也可以, 不过要结合另外的一个程序 PHONON。
- 8, 源码获得: 获得 vasp 的源码相对较为容易, 而 Castep 源码的获得很难, 即使计划直接从国外购买。
- 9, 有些研究者认为 CASTEP 计算的体系可以比 VASP 略大一点, 但是造成的结果是: 牺牲了精度。

以上内容来自分子模拟论坛:

<http://www.mdbbs.org/viewthread.php?tid=14614&extra=&highlight=VASP>

大规模计算时, 64 位的 CPU 比 32 位的快么?

从原理上面来说, 32 位的处理器内部总线字长为 32 位, 对应 64 位的处理器就是 64 位了。目前的 32 位处理器的最大地址是 4GB, 就是因为 32 位地址的缘故 (2 的 32 次方)。而 64 位的处理器则突破了这个限制, 可以用更大的内存。

从 32 位到 64 位表面上好象只是 CPU 字长增大了一倍, 实际上它使寻址范围、最大内存容量、数据传输和处理速度、数值精度等指标也成倍增加。带来的结果就是 CPU 的处理能力得到大幅提升, 尤其是对强烈依赖数值运算、存在巨量数据吞吐和需要超大并发处理的应用提升效果非常明显。

简单说来, 做为使用者, 在其它硬件一定的情况下, 如果 CPU 是 64 位的, 那么就去找 64 位的程序来运行, 这样比在 64 位 CPU 上运行 32 位的程序效果好。在计算精度上, 在编译正确的情况下, 无论是 32 和 64 位的 CPU, 还是 32 位和 64 位的程序, 对计算结果不会产生本质的影响。毕竟, 作为科研工作者, 在时间允许的情况下, 精度要比速度更重要一些。



国内重要课题组简介：合肥微尺度物质科学国家实验室理论与计算科学研究部

背景

合肥微尺度物质科学国家实验室是科技部2003年11月批准筹建的五个国家实验室之一。实验室“建设计划任务书”于2004年11月通过了科技部组织的海内外专家的论证。

合肥微尺度物质科学国家实验室是在长期坚持学科交叉与融合的基础上，通过对相关重点实验室资源的优化整合，逐步形成的一个以多学科综合为特点、以国家重大战略需求和交叉前沿领域为导向的新型实验室，其学科领域涉及物理、化学、材料、生物和信息，实现了五大一级学科之间大跨度的整合。实验室现设有7个研究部和1个公共技术部。其中之一就是专业从事理论计算研究的理论与计算科学部。

唐叔贤院士为合肥微尺度物质科学国家实验室主任，侯建国院士为常务副主任。

人员构成

现任理论与计算科学研究部主任由杨金龙教授担任，杨金龙教授入选教育部“长江学者奖励计划”第四批特聘教授，并获得国家杰出青年科学基金。研究部的主要研究成员有丁泽军教授（杰出青年），侯中怀教授，李群祥教授，李震宇副教授，梁万珍教授（百人计划），林子敬教授（百人计划），潘必才教授（百人计划），石勤伟副教授，吴明卫教授（杰出青年，百人计划），徐瑞雪副教授，袁岚峰副教授。

中长期战略目标

保持理论紧密结合实验的特点，发展量子力学计算新理论和新方法，建立有自主知识产权的研究微小尺度物质体系的通用计算程序，在国际理论和计算科学领域取得一定的学术影响。

重点任务和研究方向

近期研究方向和主要内容：

- ◇ 微尺度物质体系的结构和电子结构
- ◇ 纳米和分子器件的输运理论
- ◇ 复杂体系理论计算的新方法和新理论
- ◇ 多体理论与非平衡统计物理
- ◇ 生物大分子结构、功能的计算机模拟，生物系统计算建模与动力学分析

计算资源

硬件：

杨金龙教授的课题组所使用硬件计算资源可以分为三部分：研究组内部自建的一组Linux-Cluster；中科科技大学的超算中心；付费使用的上海超算中心或中科院超算中心等。其中，中国科技大学超算中心所具有的计算资源有：

- 1, 共享内存计算机 HP SuperDome
峰值 0.77TFLOPS 2004 年购买
- 2, 计算集群 HP RX2600
峰值 0.38TFLOPS 2004 年购买
- 3, IBM 刀片计算集群
峰值 1.8TFLOPS 2007 年购买
- 4, Linux 计算集群 联想 1800
峰值 4.7TFLOPS 2008 年联想赠送
- 5, 曙光 4000A
- 6, 国产龙芯, KD50-I 高性能计算机

软件：

MedeA-VASP
Atomistix ToolKit (ATK)
Amsterdam Density Functional (ADF)
WIEN2K
Abinit
CPMD
SIESTA
等

在研项目

分子尺度上量子行为和调控的理论
固体氧化物点缺陷计算软件及其对燃料电池模拟的应用
碳纳米管中掺杂纳米线的结构及其热力学性质的理论计算研究
纳米尺度电路的数学建模及模拟
受限空穴型半导体的自旋动力学理论
定量表面电子能谱中的表面效应问题研究
应用量子化学

金属小团簇及其电子性质的隧道显微技术和第一性原理计算的研究
自旋电子学中的多体问题的理论研究
电子束表面分析的蒙特卡洛模拟研究
对于氢键本质的理论与计算研究

杨金龙 教授	"973" 计划
林子敬 教授	国家自然科学基金
潘必才 教授	国家自然科学基金
石勤伟 副教授	国家自然科学基金
吴明卫 教授	国家自然科学基金
丁泽军 教授	国家自然科学基金
曾晓成 教授	国家自然科学基金
杨金龙 教授	
杨金龙 教授	国家自然科学基金
吴明卫 教授	省部级项目
丁泽军 教授	省部级项目
袁岚峰 副研究员	省部级项目

最新论文

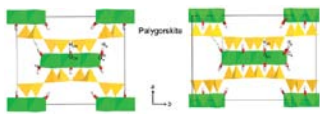
- 1), J. L. Cheng, M. W. Wu, and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* 2010(104):016601
- 2), H.J. Xiang, E.J. KAN, S. H. WEI et al., *Nano lett.* 2009(9):4025
- 3), G. Y. Gou, B. C. Pan, L. Shi, *J. Am. Chem. Soc.* 2009(131):4839
- 4), S. A. Pan, Q. Fu, T. Huang, et al., *P. Natl. Acad. Sci. USA* 2009(106):15259
- 5), Y. Zhao, Z. Wang, X. F. Cui, B. Wang, J. L. Yang, J. G. Hou, *J. Am. Chem. Soc.* 2009(131):7958
- 6), Chen Q, Chen T, Pan GB, Yan HJ, Yang JL et al., *P. Natl. Acad. Sci. USA* 2008(105): 16849
- 7), Kan EJ, Li ZY, Yang JL, Hou JG *J. Am. Chem. Soc.* 2008(130):4224
- 8), Chen L, Hu ZP, Zhao AD, Wang B, Luo Y, Yang JL, Hou JG, *Phys. Rev. Lett.* 2007(99):146803
- 9), Huang T, Hu ZP, Zhao AD, Wang HQ, Wang B, Yang JL, Hou JG, *J. Am. Chem. Soc.* 2007(129):3857
- 10), Xiang HJ, Yang JL, Hou JG, Zhu QS, *Phys. Rev. Lett.* 2006(97):266402.
- 11), Xiang HJ, Yang JL*, Hou JG, Zhu QS, *J. Am. Chem. Soc.* 2006(128):2310
- 12), Zhao AD, Li QX, Chen L, Xiang HJ, Wang WH, Yang JL, Hou JG, Zhu QS, *Science* 2005(309):1542
- 13), Zhao J, Zeng C, Cheng X, Wang K, Wang G, Yang JL, Hou JG, Zhu QS, *Phys. Rev. Lett.* 2005(95):045502
- 14), Li ZY, Yang JL*, Hou JG, Zhu QS, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2004(43):6479

* 本公司新的 Newsletter 隆重推出“知名院所”栏目，热烈欢迎各研究院所与我们联系推荐！

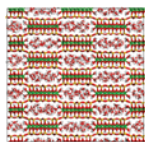
利用 VASP 进行的研究

来源: N. W. Ockwig, J. A. Greathouse, J. S. Durkin, R. T. Cygan, L. L. Daemen, T. M. Nenoff, Nanoconfined Water in Magnesium-Rich 2:1 Phyllosilicates. *J. Am. Chem. Soc.* 2009(131):8155-8162 (IF:8.091)
 软件: VASP, LAMMPS
 方法关键词: Nanoconfined Water, Clay materials, Inelastic neutron scattering, DFT, ab initio MD, Classical MD

模型: 两种镁原子富集的多层硅酸盐 palygorskite 和 sepiolite. 应用于第一性原理研究的模型如图 (a) 和 (b), 应用于经典动力学研究的模型如图 (c)。



利用 VASP 第一性原理优化得到的 Palygorskite 和 Sepiolite 晶胞的模型。其中, 黄色四面体和绿色八面体分别代表 Si 和 Mg 原子, 水分子和粘土中的氢氧基用柱状表示。



通过 LAMMPS 经典分子动力学平衡得到的含水的 Sepiolite 结构快照图。水分子在 Sepiolite 通道中, 并与镁原子层的边缘结合。水分子的羟基垂直于镁原子层。

研究思路:

研究者利用中子非弹性散射, 第一性原理, 从头算动力学和经典动力学方法研究了纳米局促的水在两种不同结构的多层硅酸盐-Palygorskite 和 sepiolite 中的动态行为。在这项研究中, 综合了几种互补的方法, 利用光谱学方法矫正修正理论计算结果, 利用不同尺度的计算方法研究不同尺度体系的结构和光谱性质。

具体计算过程: 先利用第一性原理进行结构优化, 使用 PAW 方法, 交换相关势使用 GGA-PW. 截断势为 600eV, 然后使用优化后的结构作为从头算动力学的输入结果, AIMD 模拟使用截断势为 400eV; 最后使用 CLAYFF 力场和 SPC 水模型对含有纳米局促水的体系进行经典分子动力学模拟。

主要结果:

Table 1. Unit Cell Parameters from DFT Geometry Optimization, CMD Simulation, and Experiment

	palygorskite		sepiolite	
	DFT ^a	CMD ^b experiment ¹²	DFT ^a	CMD ^b experiment ¹²
a/A	14.11	12.84 (4)	13.82	13.01 (3)
b/A	17.40	18.03 (2)	26.52	26.78 (3)
c/A	5.17	5.31 (1)	5.19	5.36 (1)
α/deg	90.0	90.0	90.0	90.0
β/deg	81.9	68.3 (1)	74.8	90.0
γ/deg	90.0	90.0	90.0	90.0
V/A ³	1257	1142 (4)	1190.89	1862 (3)
			1902	1867 (3)
				1910.4 (1)

^a Simulated systems contain only structural water without pore water.

Table 2. Comparison of Experimental and Simulation Mg-O Distances and First-Sphere Coordination Numbers (CN) in Palygorskite and Sepiolite

Mg-O bond ^a	palygorskite			
	experimental ¹²	DFT ^b	AMD ^c	CMD ^d CN ^e
Mg-O ₁	2.03 (1)	2.10 (5)	2.10 (9)	2.05 (8)
Mg-O ₂	2.03 (1)	2.06 (4)	2.05 (8)	2.11 (7)
Mg-O ₃	2.03	2.10 (3)	2.08 (7)	2.17 (9)

Mg-O bond ^a	sepiolite			
	experimental ¹⁶	DFT ^b	AMD ^c	CMD ^d CN ^e
Mg-O ₁	2.08 (1)	2.00 (4)	2.06 (7)	2.07 (6)
Mg-O ₂	2.07 (1)	2.05 (3)	2.03 (5)	2.11 (8)
Mg-O ₃	2.06 (1)	2.08 (1)	2.05 (1)	2.19 (6)

表 2 分别比较在 Palygorskite 和 Sepiolite 两种不同材料中实验与计算所得的 Mg 与不同类型氧原子之间的距离和 CN 数

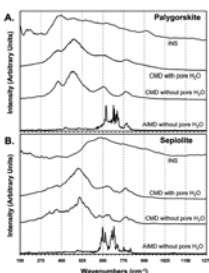
表 1 通过第一性原理结构优化, 经典分子动力学模拟和实验得到的两种多孔材料 Palygorskite 和 Sepiolite 的晶格参数。体系中仅有结构结晶水, 没有孔中的纳米局促水。

Table 3. Comparison of 90 K CMD Simulation Mg-O Distances and First-Sphere Coordination Numbers (CN) for Palygorskite and Sepiolite with and without Pore Water

Mg-O bond ^a	palygorskite		
	with pore water	without pore water	
Mg-O ₁	Mg ^b CN ^c	Mg ^b CN ^c	
Mg-O ₂	2.05 (8)	3.97	2.03 (3)
Mg-O ₃	2.11 (7)	1.18	2.11 (3)
Mg-O ₄	2.17 (9)	0.77	2.18 (3)

Mg-O bond ^a	sepiolite		
	with pore water	without pore water	
Mg-O ₁	Mg ^b CN ^c	Mg ^b CN ^c	
Mg-O ₂	2.07 (7)	4.00	2.08 (1)
Mg-O ₃	2.11 (7)	1.50	2.12 (1)
Mg-O ₄	2.18 (9)	0.50	2.18 (1)

表 3 分别比较在两种不同材料中存在于不在纳米局促水的情况下, 利用 CMD 计算得到的 Mg 与不同类型氧原子之间的距离和 CN 数

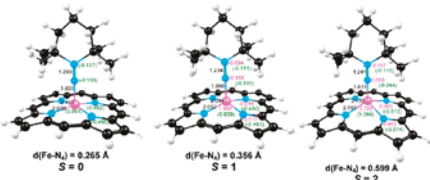


实验和模拟得到的 (A)palygorskite 和 (B)sepiolite 中的含氢组分的振动光谱对比图。除了从头算动力学得到的光谱是在 300K 下的外, 其余光谱都是在 90K 下得到的。

利用 ADF 进行的研究

来源: J. Conradie, A. Ghosh, Electronic Structure of an Iron-Porphyrin-Nitrene Complex. *Inorg. Chem.* 2010(49):243-248 (IF:4.147)
 软件: Amsterdam Density Functional (ADF)
 关键词: Iron-Porphyrin-Nitrene complex, Electronic Structure, DFT, Spin States, MO energy level

模型: 三种不同自旋态的铁卟啉氮宾复合物, 如下图所示,



利用 OLYP/TZP 优化所得的三种不同自旋态 (S=0, 1, 2) 的铁卟啉氮宾。黑色数字表示重要结构参数, Mulliken 电荷用绿色表示, 自选布局用紫红色表示。

研究思路:

利用 OLYP/TZP 优化了三种不同自旋态 (S=0, 1, 2) 和三种不同构型 (船式, 椅式和扭曲式) 的铁卟啉氮宾, 并详细的分析了这三种不同自旋态下的结构参数, 自旋态能量以及对分子轨道。进而, 研究者利用理论计算的结果解释了铁卟啉氮宾复合物的稳定性问题。

总体来说, 这篇论文在计算上没有使用太多太复杂的技巧。研究者着重分析了体系的电子状态, 精细的分析, 特别是对体系高自旋态的计算和不同自旋态之间的对比, 并由此解释了体系稳定性, 这是本论文的亮点。

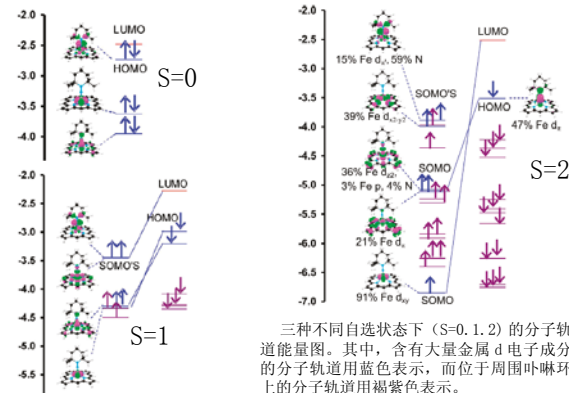
计算结果:

Table 1. Energetics of Different Spin States and Conformations of FeP(NNS)^a

piperidine conformation	S	relative energy (eV)			
		OLYP	PW91	B3LYP	B3LYP ^b
boat	0	0.99	0.26	0.97	0.79
	1	0.31	-0.22	0.33	0.19
chair	2	-0.01	-0.04	0.00	-0.01
	0	0.94	0.19	0.94	0.76
twist	1	0.25	-0.34	0.27	0.13
	2	-0.07	-0.08	-0.06	-0.06
	0	0.99	0.24	0.98	0.80
	1	0.31	-0.25	0.34	0.20
	2	0.00	0.00	0.00	0.00

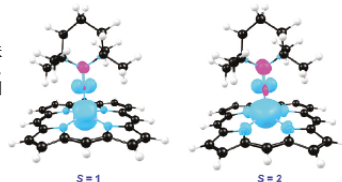
^a The S = 2 state for the twist conformation has been chosen as the zero level for energies.

不同自旋态和构型下的铁卟啉氮宾复合物的能量。扭曲式构型下的 S=2 的状态下复合物所具有的能量被设定为能量零点。



三种不同自旋状态下 (S=0, 1, 2) 的分子轨道能量图。其中, 含有大量金属 d 电子成分的分子轨道用蓝色表示, 而位于周围卟啉环上的分子轨道用紫褐色表示。

自旋态 S=1 和 S=2 情况下的铁卟啉氮宾复合物的自旋密度分布图。较大自旋密度和较小自旋密度分别用青色和紫红色表示。



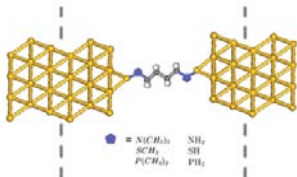
利用 ATK 进行的研究

来源: X. Y. Feng, Z. Y. Li, J. L. Yang, Electron Transport in Butane Molecular Wires with Different Anchoring Groups Containing N, S, and P: A First Principles Study. *J. Phys. Chem. C* 2009(113):21911–21914 (IF:3.396)

软件: Atomistix ToolKit (ATK)

关键词: DFT-NEGF, Butane Molecular Wires, molecular junctions, tunneling barrier model, HOMO/LUMO

模型: 具有不同端基 (键基团) 的丁烷分子线; 两侧黄色的为金原子 (电极), 灰色的表示碳原子, 白色的表示氢原子, 蓝色的表示钾基团。



研究思路:

先利用密度泛函方法对体系进行结构优化, 对金原子使用 SZP 基组, 对所有其它原子使用 DZP 基组, 使用 Perdew-Zunger LDA 描述交换相关势, 使用 Normconserving 赝势描述离子和价电子之间的相互作用。结构优化共分两步: 首先优化吸附在金 (111) 面上 R-CAH9 的结构 (R 表示不同的键基团), 然后利用优化所得的低能吸附结构, 通过一个相对于丁烷中心的反演操作构建分子结, 接下来固定两个金电极之间的距离, 再优化这个分子结体系。

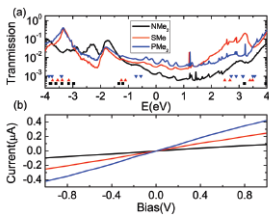
优化得到能量极小点后, 再使用非平衡格林函数方法来计算传输性质。

结果分析:

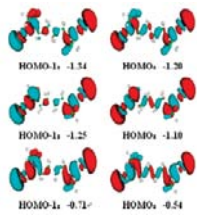
TABLE 1: The Au-X (X = N, S, P) Bond Length (Å), Transmission, Energy (eV) of the Highest Occupied MPSH Orbital (HOMO), and Charge Transfer (CT) in Unit Charge

anchoring group	Au-X	conductance	ϵ_{HOMO}	CT
N(CH ₃) ₂	2.216	0.00129	-1.20	0.075
SCH ₃	2.376	0.00311	-1.10	0.161
P(CH ₃) ₂	2.296	0.00482	-0.54	0.209
NH ₂	2.216	0.00227	-1.15	0.170
SH	2.400	0.00304	-1.02	0.163
PH ₂	2.296	0.00738	-0.66	0.378
NH ₂ (3 × 3)	2.210	0.00176	-1.34	0.266

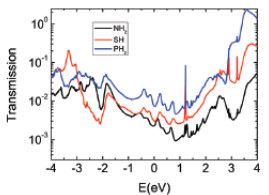
对于不同键基团的丁烷分子线模型, Au 原子和 N, S, P 原子之间的距离, 电导性, 最高占据轨道 (HOMO) 的能级和电荷转移 (以单位电荷计量)



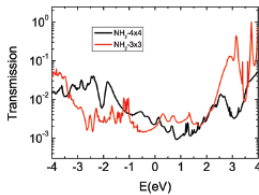
(a) 二甲胺 (黑色), 甲硫醚 (红色) 和二甲基膦 (蓝色) 的 zero-bias 透射光谱, (b) 对应的电流-电压曲线。



三个不同分子结 (从上到下依次为二甲胺, 甲硫醚和二甲基膦) 上的决定电子传输性质的 MPSH 轨道及其能级。



胺基 (黑色), 巯基 (红色) 和磷化氢 (蓝色) 的 zero-bias 透射光谱



当 Au 电极取 3*3 晶胞和 4*4 晶胞时, 计算所得的胺基的 zero-bias 透射光谱

利用 Culgi 进行的研究

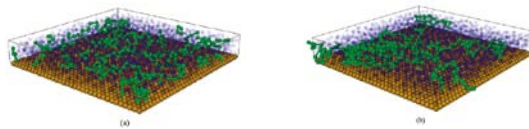
来源: R. Toth, D. J. Voorn, J. W. Handgraaf et al., Multiscale Computer Simulation Studies of Water-Based Montmorillonite/Poly(ethylene oxide) Nanocomposites. *Macromolecules*. 2009(42):8260–8270

软件: Culgi

关键词: Multiscale Simulation, Montmorillonite/Poly, DPD, Mesoscale Simulations,

模型:

这项研究所采用的模型较为复杂, 是一个用水溶解的聚合物/蒙脱土的纳米复合材料。聚合物是四种不同聚合度的聚环氧乙烷 (分别为 19, 28, 56, 113)。下图表示就是聚合度为 19(a) 和 113(b) 的聚环氧乙烷/蒙脱土组成的介观模拟的模型, 其中, 绿色的长链表示聚环氧乙烷 (PEO), 蓝色的圆点表示的是水分子, 金色的圆球表示的蒙脱土层 (MMT)。



研究思路:

他们的模拟分为 4 步: (1) 普通分子动力学模拟产生体系各组分之间的相互作用能; (2) 将能量值映射到耗散粒子动力学参数; (3) 介观模拟确定体系密度分布与形态; (4) 利用有限级别的模拟计算相对宏观性质。

这项研究是一项典型的多尺度理论模拟, 包含了经典的分子动力学模拟, 介观模拟和有限元级别的模拟。不同级别的模拟可以得到体系不同级别的性质。串联这三个不同级别的研究是这篇论文的亮点, 比如第二步介观 DPD 模拟所需要的一些参数需要从第一步原子级别的经典动力学所得到。

结果分析:

Table 1. Characteristics of the DPD Beads and Chains Used in This Work

V_b^a (Å ³)	r_c^b (Å)	N_{DPD}^c			
		PEO19	PEO28	PEO56	PEO113
262	9.23	4	6	11	23

^aDPD bead volume. ^bCutoff radius. ^cTotal number of DPD beads in each PEO chain.

本项研究中使用到的 DPD 珠与链的特性描述, 包括 DPD 珠的体积, 截断值和不同聚合度的 PEO 所含有的 DPD 珠总数。

Table 2. Bead-Bead Interaction Parameters obtained for Water-Based PEO-MMT Nanocomposites

a_{ij}	P				W	M
	PEO19	PEO28	PEO56	PEO113		
P	29.7	30.4	30.8	31.2	25	0
W	24.1	26.0	28.1	30.0	25	0
M	17.4	16.0	14.6	12.8	15	0

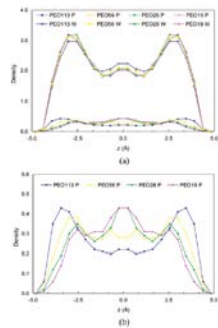
用于研究溶剂化 PEO/MMT 纳米复合体系的 DPD 模拟中使用的珠与珠之间的相互作用参数列表。

Table 3. Binding Energies in Water Systems with PEO Chains of Different Molecular Weight. Where All Energy Values Are Expressed in kcal/mol

polymer	system MMT/PEO:H ₂ O			$N_{p,m}$
	$E_{\text{bind}}(\text{MMT}/\text{PEO})$	$E_{\text{bind}}(\text{MMT}/\text{H}_2\text{O})$	$E_{\text{bind}}(\text{PEO}/\text{H}_2\text{O})$	
PEO19	-695	-5300	-891	810
PEO28	-761	-3276	-861	792
PEO56	-898	-5205	-784	738
PEO113	-1015	-5104	-641	798

^aTotal number of polymer atoms in each simulation cell.

四个不同聚合度的 PEO 与 MMT 组成的纳米复合体系中的不同组分之间的相互作用能列表, 单位为 kcal/mol。



(a) 四个不同体系的聚合物/水夹层在垂直于 MMT 的方向上的耗散粒子动力学介观密度示意图; (b) 与上图相同的数据, 去除水后更详细的显示了聚合物的密度分布趋势。

量化计算

- R. S. S. Carrera, S. A. Odom et al., Electronic Properties of the 2,6-Diiododithieno[3,2-b:2',3'-d]thiophene Molecule and Crystal: A Joint Experimental and Theoretical Study. *J. Phys. Chem. B* 2010(114):749-755 (VASP, ADF IF=4.189)
- G. Nocton, P. Horeglad, V. Vetere, J. Pecaut et al, Synthesis, Structure, and Bonding of Stable Complexes of Pentavalent Uranyl. *J. Am. Chem. Soc.* 2010(132):495-508 (ADF IF=8.091)
- J. Conradie, A. Ghosh, Electronic Structure of an Iron-Porphyrin-Nitrene Complex. *Inorg. Chem.* 2010(49):243-248 (ADF IF=5.046)
- A. Munoz-Castro, D. M. Carey, R. Arratia-Perez, Calculated Molecular Properties of Triangular Tribenzo and Perfluoro-Tribenzo Trimercuronin Macrocycles. *J. Phys. Chem. A* 2010(114): 666-672 (ADF IF=2.871)
- Z. Varga, M. Kolonits, M. Hargittai, Gas-Phase Structures of Iron Trihalides: A Computational Study of all Iron Trihalides and an Electron Diffraction Study of Iron Trichloride. *Inorg. Chem.* XXXX, XXX, 000-000 (Molpro, NBO IF=4.189)
- C. R. Kozak, K. A. Kistler, Z. Lu, S. Matsika, Excited-State Energies and Electronic Couplings of DNA Base Dimers. *J. Phys. Chem. B* 2010(DOI):10.1021/jp9072697 (GAMESS, NWChem IF=4.189)

材料计算

- A. A. Popov, L. Zhang et al., A Pseudoatom in a Cage: Trimetallofullerene $Y_3@C_{80}$ Mimics $Y_3N@C_{80}$ with Nitrogen Substituted by a Pseudoatom. *ACS Nano.* 2010(DOI):10.1021/nn901422z (GAMESS, CPMD IF=5.472)
- C. Jiang, Z. J. Lin, Y. S. Zhao, Thermodynamic and Mechanical Stabilities of Tantalum Nitride. *Phys. Rev. Lett.* 2009(103):18 5501 (VASP IF=7.180)
- G. Markopoulos, P. Kroll, R. Hoffmann, Compressing the Most Hydrogen-Rich Inorganic Ion. *J. Am. Chem. Soc.* 2010(132):748-755 (VASP IF=8.091)
- J. B. Park, J. Graciani et al., Gold, Copper, and Platinum Nanoparticles Dispersed on $CeO_x/TiO_2(110)$ Surfaces: High Water-Gas Shift Activity and the Nature of the Mixed-Metal Oxide at the Nanometer Level. *J. Am. Chem. Soc.* 2010(132):356-363 (VASP IF=8.091)
- C. H. Ko, M. J. Huang, M. D. Fu, C. H. Chen, Superior Contact for Single-Molecule Conductance: Electronic Coupling of Thiolate and Isothiocyanate on Pt, Pd, and Au. *J. Am. Chem. Soc.* 2010(132):756-764 (ATK IF=8.091)
- P. Zhao, P. J. Wang, Z. Zhang, D. S. Liu, Electronic transport properties of a molecular switch with carbon nanotube electrodes: A first-principles study. *Phys. B* 2010(405):446-450 (ATK IF=0.822)
- G. B. Abadir, K. Walus, D. L. Pulfrey, Bias-dependent amino-acid-induced conductance changes in short semi-metallic carbon nanotubes. *Nanotechnology.* 2010(21):015202 (ATK IF=3.446)
- Z. C. Wang, S. Tsukimoto, M. Saito, Ohmic contacts on silicon carbide: The first monolayer and its electronic effect. *Phys. Rev. B* 2009(80):245303 (ATK IF=3.332)
- H. Fukuoka, S. Yamanaka, High-Pressure Synthesis, Structure, and Electrical Property of Iodine-Filled Skutterudite $IO_9Rh_4Sb_{12}$; First Anion-Filled Skutterudite. *Chem. Mater.* 2010(22):47-51 (WIEN2K IF=5.046)

分子模拟

- R. Toth, D. J. Voorn et al., Multiscale Computer Simulation Studies of Water-Based Montmorillonite/Poly(ethylene oxide) Nanocomposites. *Macromolecules.* 2009(42):8260-8270 (CULGI IF=4.146)
- A. P. Prskalo, S. Schmauder, C. Ziebert et al., Molecular dynamics simulations of the sputtering of SiC and Si_3N_4 . *Surf. Coat. Technol.* 2009(DOI): 10.1016/j.surfcoat.2009.09.043 (Materials Explorer IF=1.860)
- M. Takeuchi, Y. Kameda, Y. Umebayashi, S. Ogawa et al, Ion-ion interactions of $LiPF_6$ and $LiBF_4$ in propylene carbonate solutions. *J. Mol. Liq.* 2009(148):99-108 (Materials Explorer IF=1.188)

期刊简介

Nano lett.

2008 IF=10.371

全名为: Nano letters, 隶属于美国化学会 (ACS)。它是世界上在纳米研究领域最有影响力的期刊之一, 在 ISI 统计的纳米领域的近 50 种期刊中, 它的影响因子排在第二位, 论文引用数排在第一。

该期刊主要报道纳米科学和纳米技术领域所有分支的基础研究进展, 发表纳米尺度内的物理, 化学, 生物方面的实验和理论研究。其主要感兴趣的领域集中在以下 4 个方面:

- (1) 利用物理, 化学, 生物方法进行的纳米尺度材料的合成及处理;
- (2) 自组装和相互作用体系的建模和模拟;
- (3) 与尺度相关的性质表征;
- (4) 新的纳米结构和器件的实现与应用。

Phys. Rev. Lett.

2008 IF=7.180

全名为: Physical Review Letters, 隶属于美国物理学会 (APS)。它是 APS 的旗舰期刊, 是物理学领域中的最卓越的期刊之一。它致力于快速发表物理学所有领域的具有短篇快讯性质的基础性研究论文。

该期刊创办于 20 世纪 50 年代晚期, 逐渐成为国际性的最受关注的期刊之一, 引导着物理及其交叉领域最主要的发展。该期刊主要致力于以下方面: 普通物理 (包括统计, 量子力学, 量子信息等), 引力与天体物理; 基本粒子与场; 核物理; 原子, 分子和光物理; 非线性动力学; 流体动力学; 经典光学; 凝聚态物质; 软物质, 生物和跨学科物理学。

该期刊在物理领域的影响力和 *J. Am. Chem. Soc.* 在化学领域的影响力相当, 是物理领域最受研究者推崇的顶级期刊之一。