

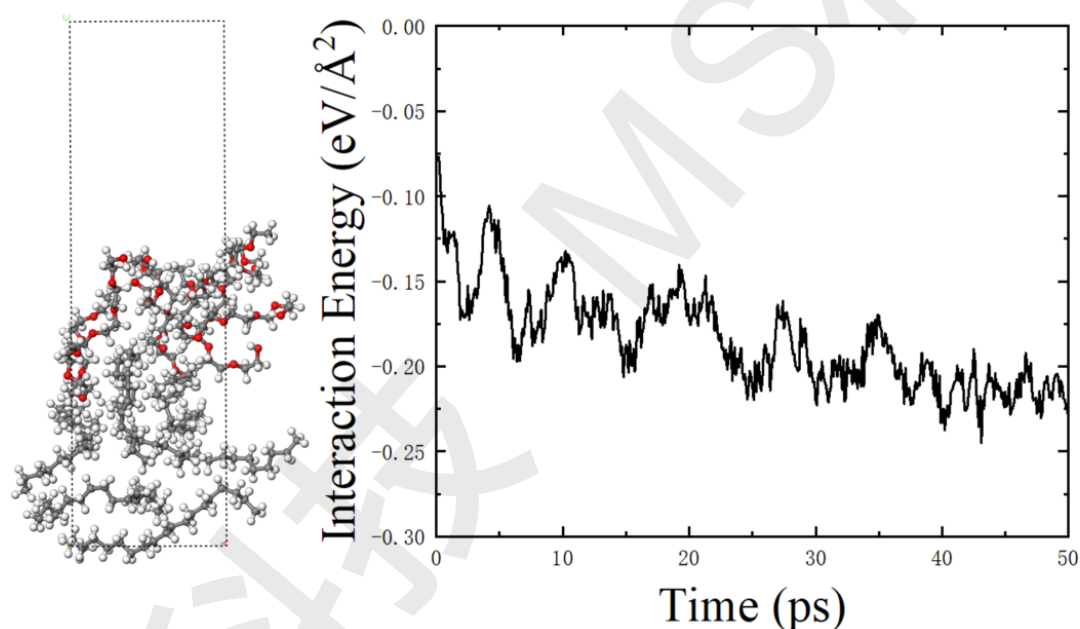
4 步出图！相互作用能/结合能脚本改进版：用法、视频、注解、代码全文！

相互作用能，又称结合能，计算公式为：

$$E(\text{interaction}) = E(\text{layer1+2}) - E(\text{layer1}) - E(\text{layer2})$$

研究两个片段（如无机表面与溶液、无机表面与聚合物、聚合物与聚合物）之间的相互作用时，需要跑分子动力学，并对其中每一帧的两层结构分别拆开进行能量计算，并执行上述减法。

轨迹长达数万帧时，手动操作可能得算 1 年，利用脚本只需不到 1 分钟。



全脚本展示在本文最下方！本次为大家介绍的是 MS 官方脚本-相互作用能的第 4 次改进版（第 1 版发布于 2009 年），针对 Forcite/Gulp/Mesocite 模块开发。原作者为 BIOVIA 的 Stephen Todd，该作者还有另一款针对 DMol3 开发的相互作用能的脚本，杨站长将在下次推文中发布。整个脚本已在最下方完全展示。该脚本及配合使用案例，请在后台留言“脚本”下载（包含 32 个脚本）。

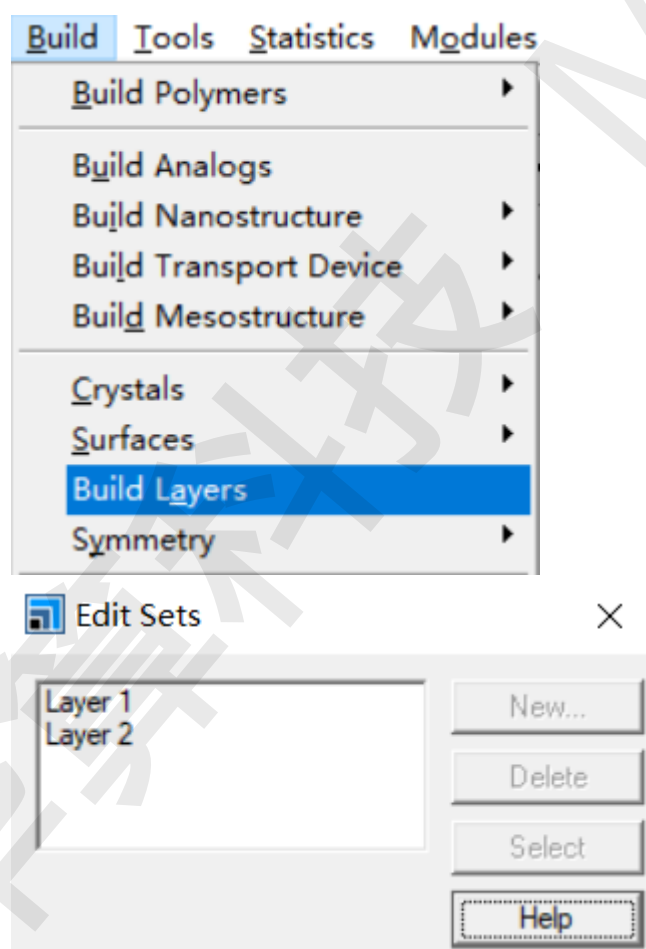


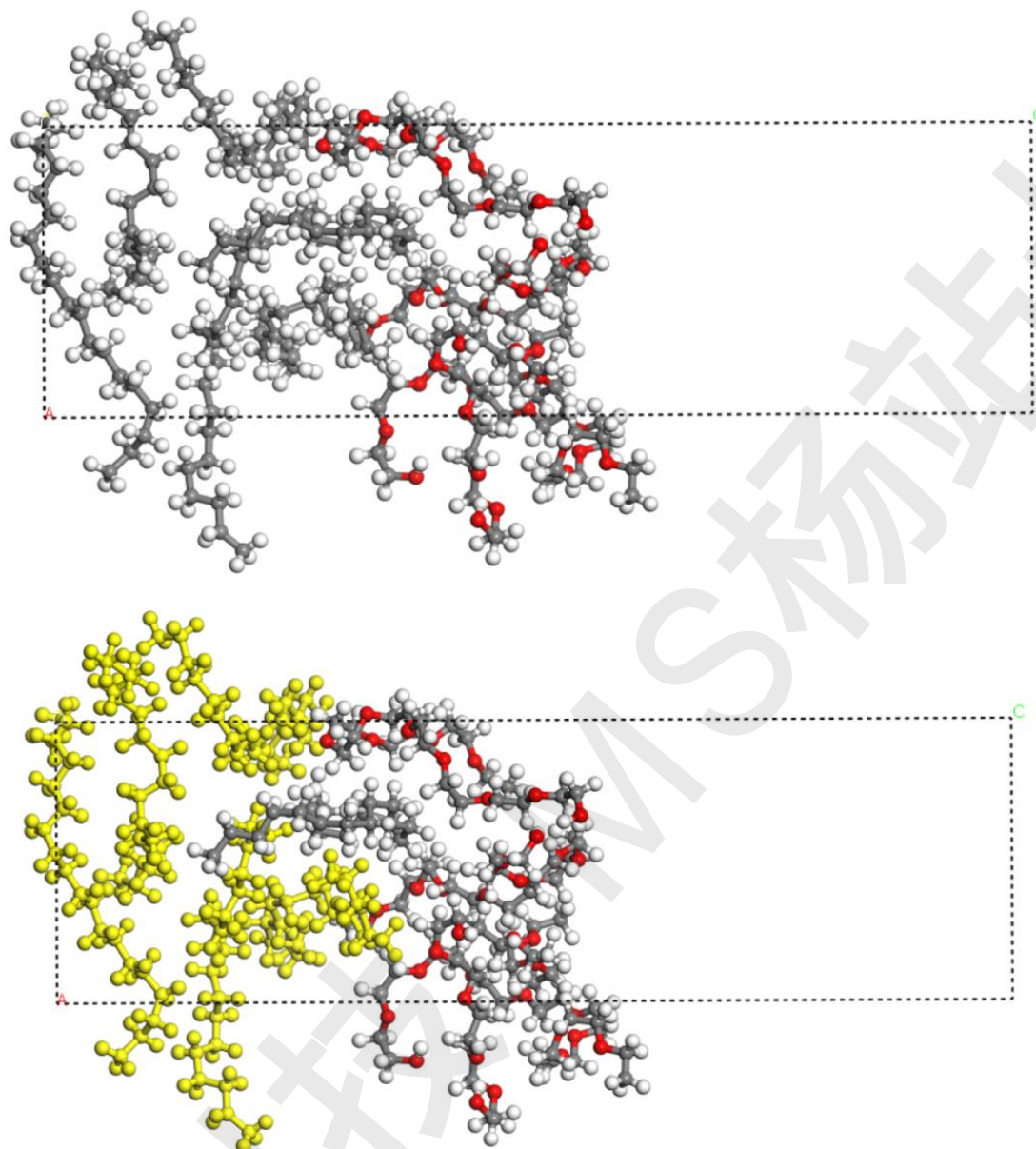
MS 杨站长

华算科技-杨老师讲 Materials Studio, DFT 计算, 分子模拟建模, 分子动力学
公众号

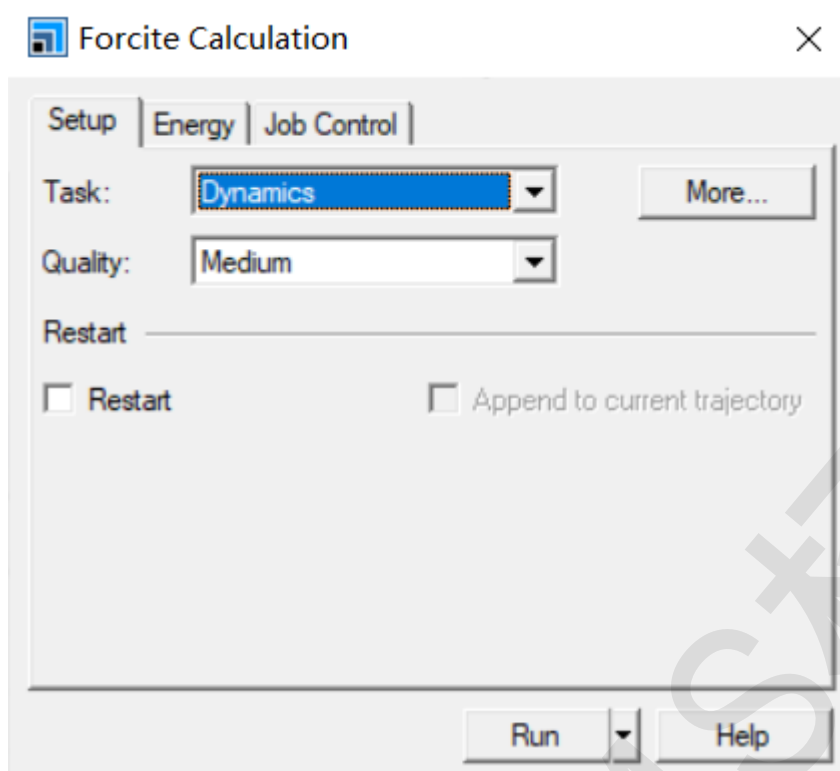
轨迹文件、脚本、运行结果皆包含在压缩包内的 **InteractionEnergy** 路径中。

脚本用法：1：建好两层各自结构，用 Build-Layers 工具将两层组合在一起。





2. 采用 Forcite 模块，设置好系综等参数，跑分子动力学，得到轨迹 *.xtd。

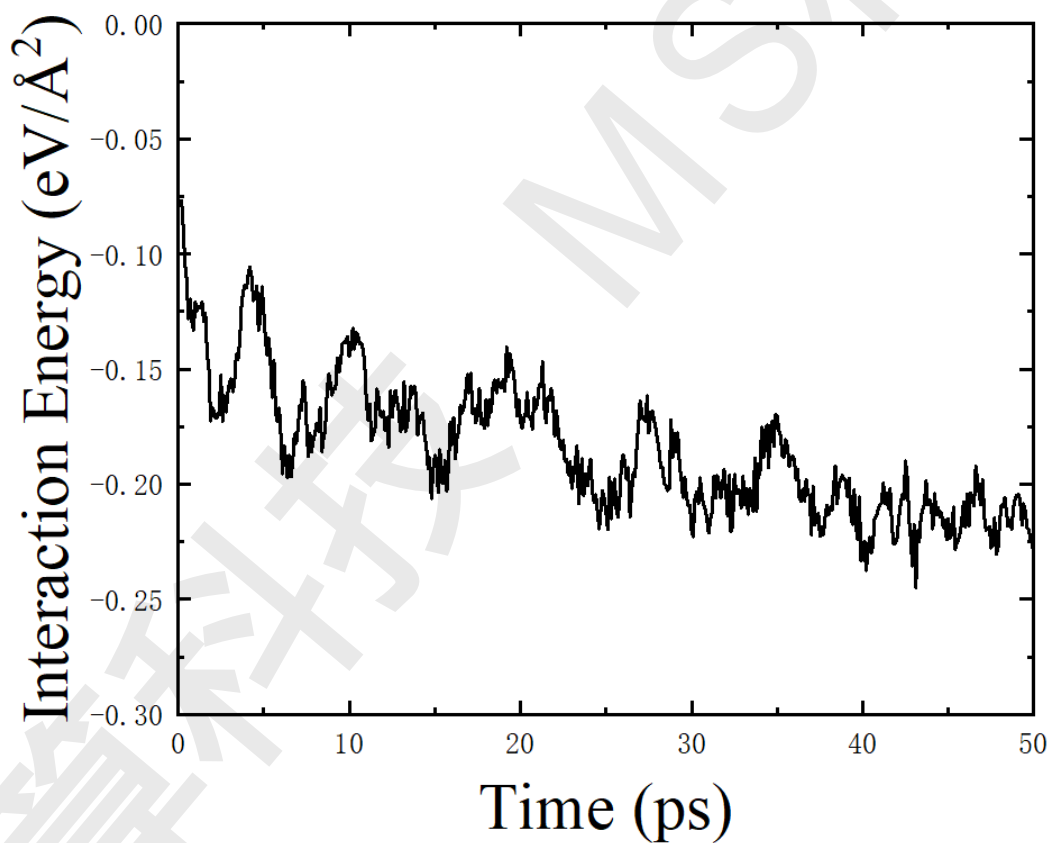
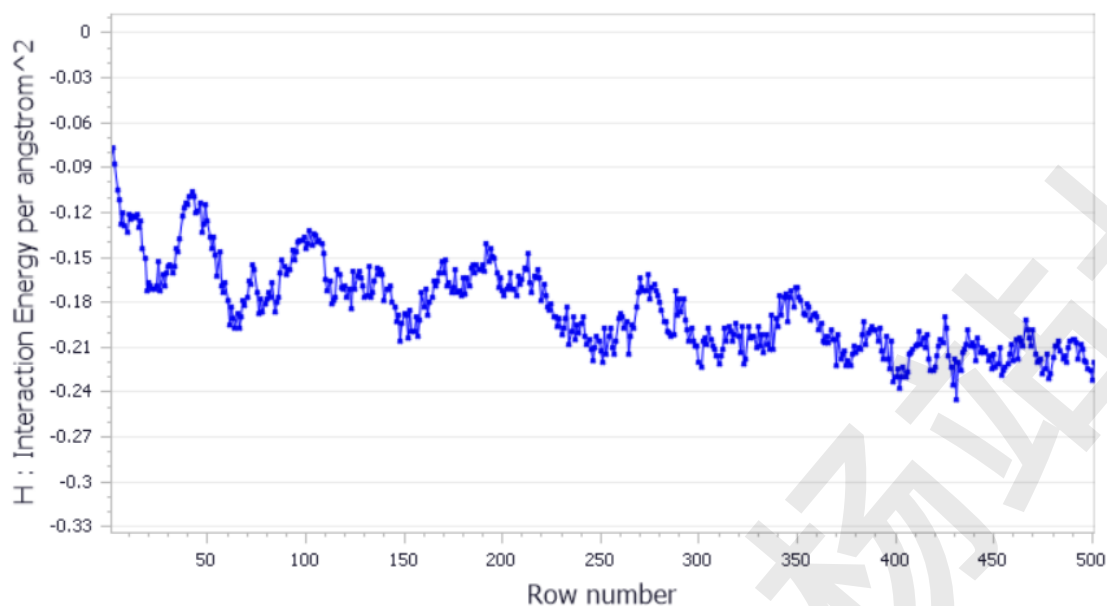


3. 打开脚本, 将xtd 文件名改成第 2 步得到的轨迹名称, 点 run on server 运行, 得到表格。

	A	B	C	D	E	F	G	H
	Layer Cell	Energy of Layer Cell	Layer 1	Energy of Layer 1	Layer 2	Energy of layer 2	Interaction Energy	Interaction Energy per angstrom ²
1	all	1.493376e+003	Layer1	546.97192502	Layer2	960.99065337	-14.58668405	-0.06482971
2	all	1.474524e+003	Layer1	506.10781946	Layer2	991.69540254	-23.27888435	-0.10346171
3	all	1.431459e+003	Layer1	494.03978666	Layer2	950.52625517	-13.10684609	-0.05825265
4	all	1.459932e+003	Layer1	493.21798452	Layer2	985.74534578	-19.03083328	-0.08458148
5	all	1.480597e+003	Layer1	514.50099268	Layer2	977.77121540	-11.67569590	-0.05189198
6	all	1.398772e+003	Layer1	479.92404204	Layer2	940.48461322	-21.63650930	-0.09616226
7	all	1.376924e+003	Layer1	463.19414458	Layer2	930.77015103	-17.04048037	-0.07573547
8	all	1.495449e+003	Layer1	501.48692620	Layer2	1.006690e+003	-12.72805929	-0.05656915
9	all	1.458945e+003	Layer1	506.59624742	Layer2	971.47413044	-19.12489405	-0.08499953
10	all	1.474302e+003	Layer1	493.83840505	Layer2	1.001078e+003	-20.61492185	-0.09162187
11	all	1.424449e+003	Layer1	509.19583988	Layer2	935.17136318	-19.91817364	-0.08852522

4. H 列为相互作用能每平方埃, 选中后点此功能作图。





杨站长注解：

1. 本脚本可以计算结构中两个片段之间的相互作用，比如金属表面与聚合物之间、金属氧化物与溶液之间、聚合物与聚合物之间，只要能找到合适力场的，都可以计算。
2. 计算时，这两层必须被命名为 Layer 1 与 Layer 2。
其实无须额外注意，一般采用 build layer 小工具构建的结构，默认名称就是这两者。两层结构均为电中性。
3. 本脚本只需要一个分子动力学的轨迹，无须调试。

4. 杨站长已将力场类型更改为 COMPASS，如有需要请自行更改。
5. 本脚本采用的结合面为 AB 面，结合方向为 C 方向，三轴必须互相垂直。
6. 结构中必须有很厚的真空层，厚度必须大于非键截断半径。这里很容易出错。
7. 本脚本将创建一个表格，将计算结果中的能量、结合能、结合能每平方埃的数据输出进表格中。