

# 从微观到宏观 多尺度理论计算解决方案

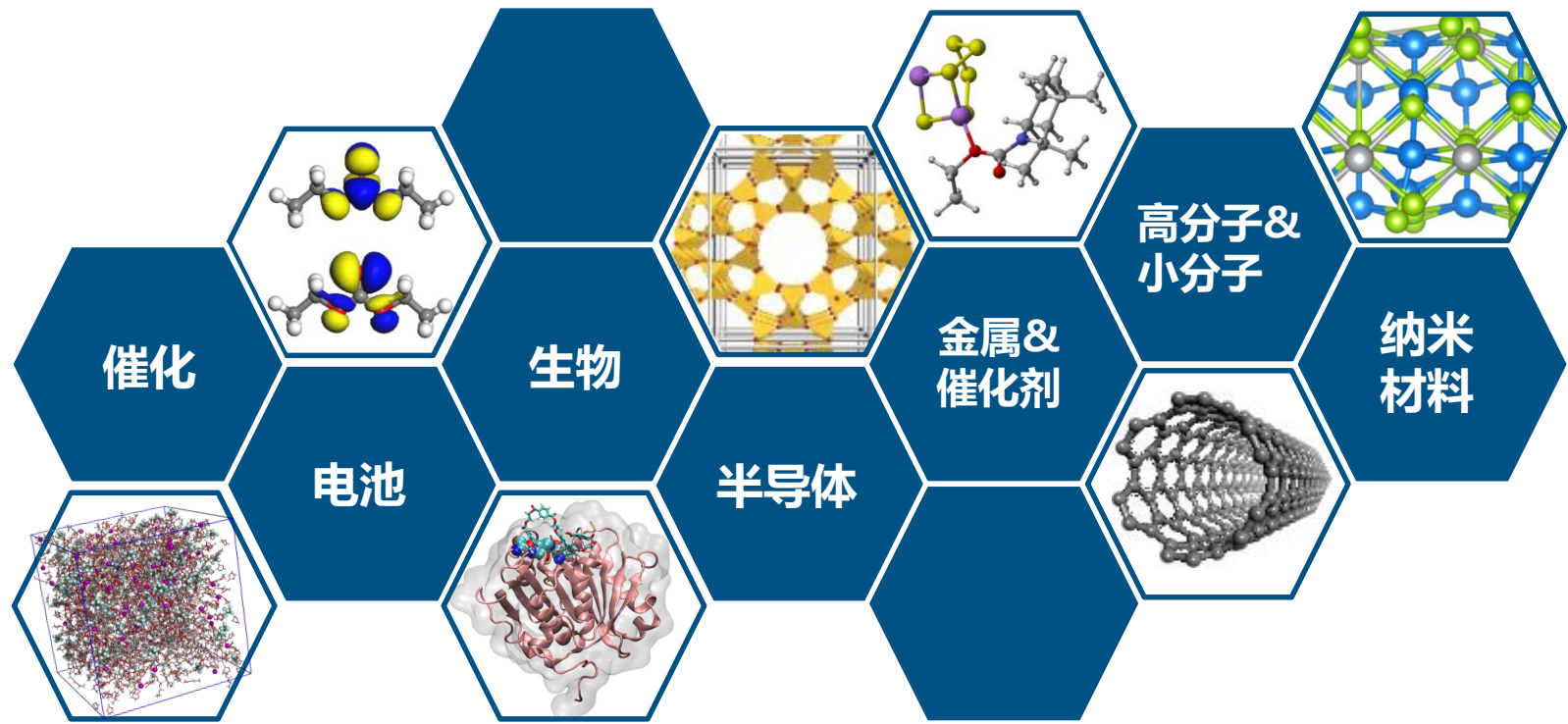
深圳华算科技有限公司

2022

# 关于华算

做计算 找华算

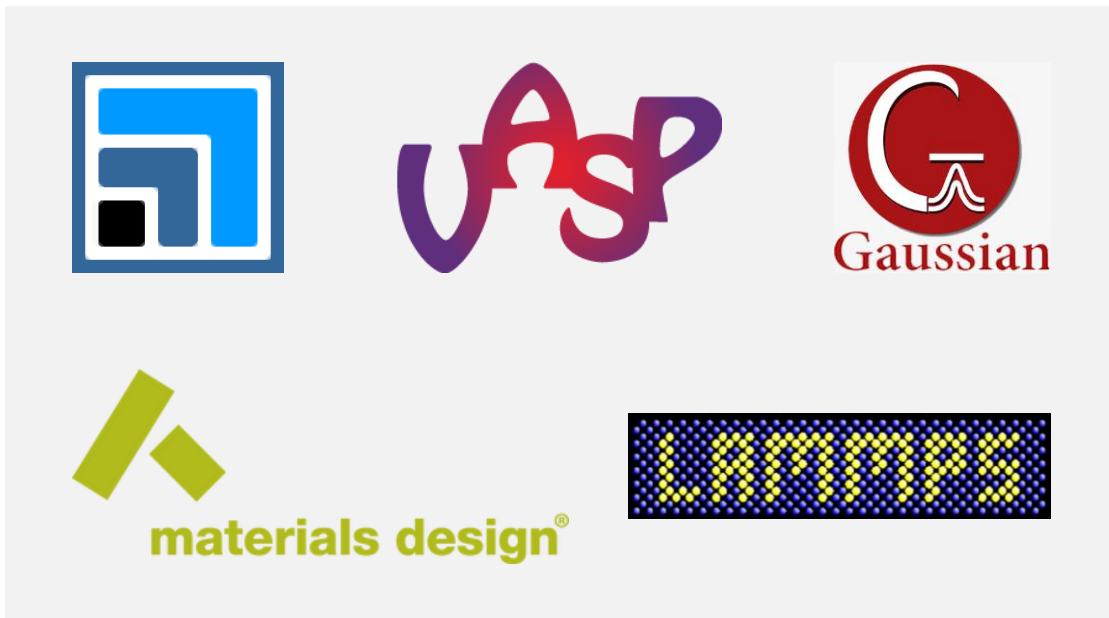
华算科技是科研服务领域专业的理论计算解决方案服务商，专注于实验科学与理论计算的融合与创新，为企业和高校客户提供专业的第一性原理、量子化学、分子动力学、机器学习、高通量计算、有限元仿真等多尺度理论计算解决方案。



# 关于华算

做计算 找华算

## 版权与合规



华算科技已购买多款计算软件商业版权（Materials Studio、VASP、Gaussian、MedeA、LAMMPS等），保障客户的计算数据安全合规。

## 高性能计算资源



- 天河二号超算中心
- 独享计算节点
- 丰富的软件资源
- 严密的信息保护
- 灵活的计算需求响应

# 全职海归技术团队

做计算 找华算

华算全职技术团队由多位深圳市海外高层次人才工程师领衔，拥有多领域的理论计算经验和高水平国际期刊发表经验。

华算科技已向国内外600多家高校/单位提供了超过10000项理论计算和测试表征服务。

**10000+**

成功服务案例

**300+**

博士工程师团队

**600+**

高校/企业客户

ROYAL SOCIETY  
OF CHEMISTRY

Angewandte  
International Edition  
Chemie

nature

ADVANCED  
MATERIALS

J|A|C|S  
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

ACS  
Chemistry for Life®

Science

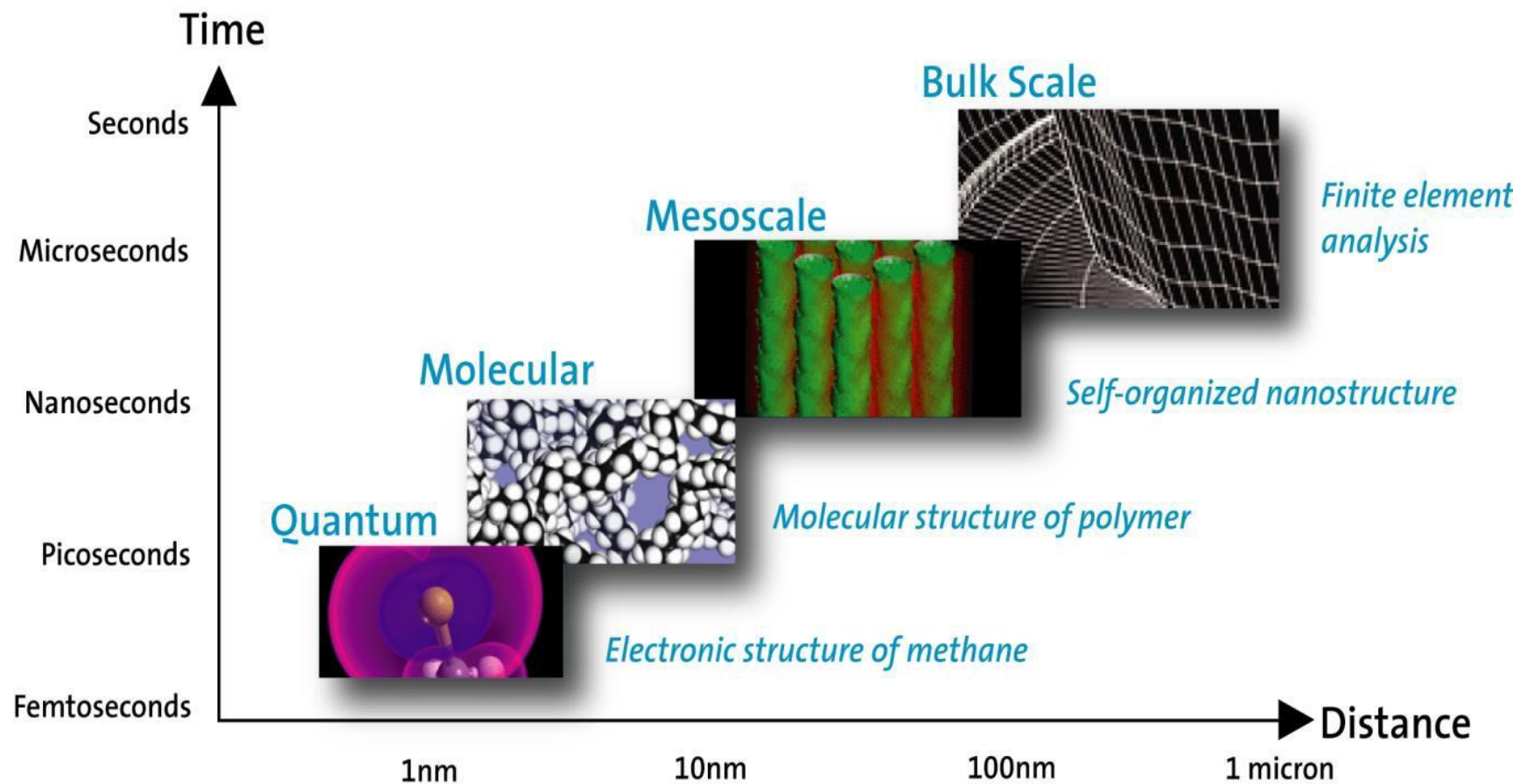
Energy &  
Environmental  
Science

Chem

部分理论计算客户研究成果已发表在Nature系列、Science系列、AM系列、ACS系列、RSC系列、EES等国际顶级期刊。

# 多尺度理论计算解决方案

做计算 找华算



- 第一性原理
- 量子化学
- 分子动力学
- 生物模拟
- 机器学习
- 有限元仿真

# 多尺度理论计算-第一性原理

做计算 找华算

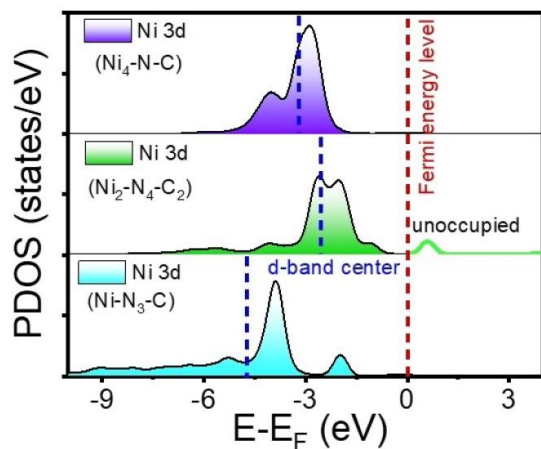
基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理计算直接基于基本物理原理而不依赖于经验参数, 能够在合成材料之前预测其可能的物性, 应用领域包括催化、电池、半导体、金属材料、非金属材料、合金、纳米材料等。

## 计算软件

VASP  
Materials Studio  
CP2K  
QE等

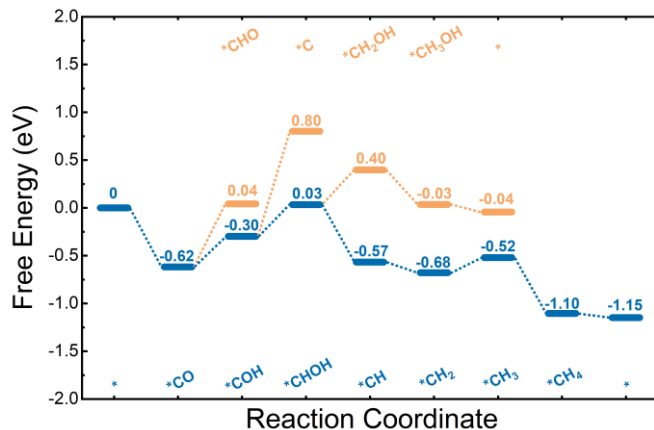


## 计算方案包括但不限于:



## 电子性质:

- 能带结构
- 态密度
- 差分电荷密度
- 电荷局域密度等



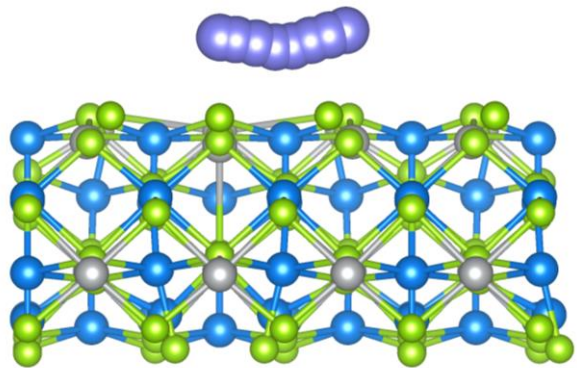
## 反应机理:

- 表面催化反应
- HER、OER、NRR、CO2RR等
- 电催化、光催化、热催化等
- 反应路径自由能等



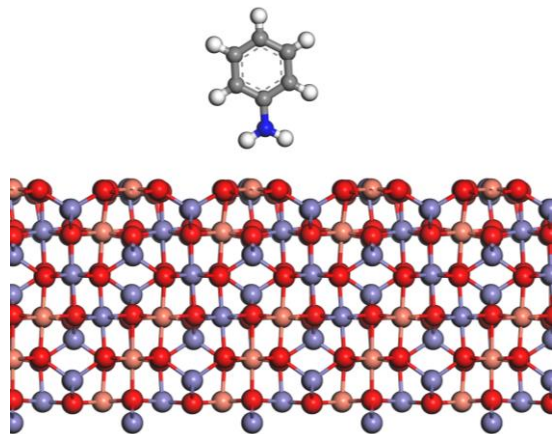
# 多尺度理论计算-第一性原理

做计算 找华算



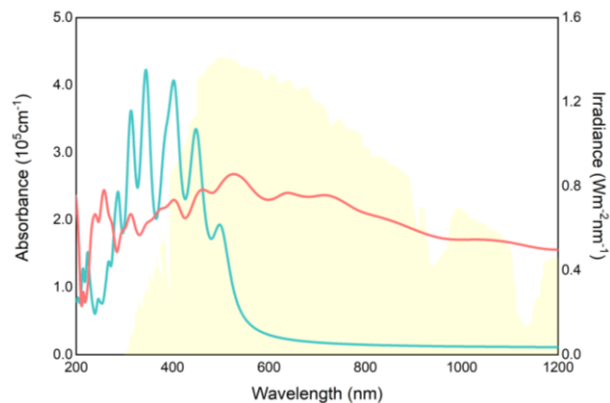
## 过渡态搜索:

- 离子扩散能垒
- 离子扩散路径
- 反应能垒
- 理论反应路径等



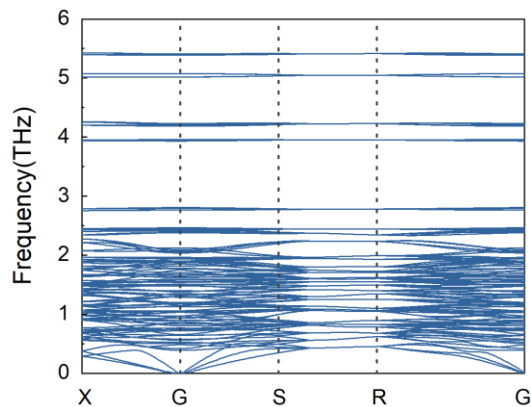
## 吸附体系:

- 晶体表面
- 团簇模型
- 二维材料
- 分子体系等



## 光学性质:

- 光吸收谱
- 介电函数
- 消光系数
- 反射系数等



## 声子性质:

- 声子谱
- 声子态密度
- 稳定性
- 热导率等

# 多尺度理论计算-量子化学

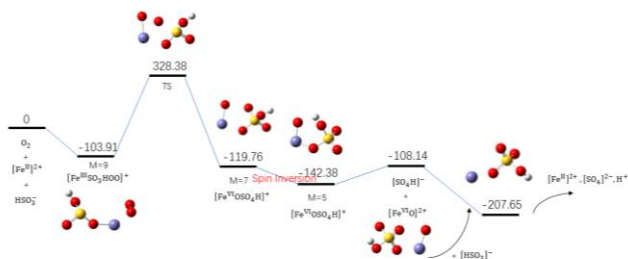
做计算 找华算

量子化学研究范围包括稳定和不稳定分子的结构、性能及其结构与性能之间的关系；分子与分子之间的相互作用；分子与分子之间的相互碰撞和相互反应等问题。应用领域包括小分子、团簇、低聚物、自由基、离子等。

计算方案包括但不限于：

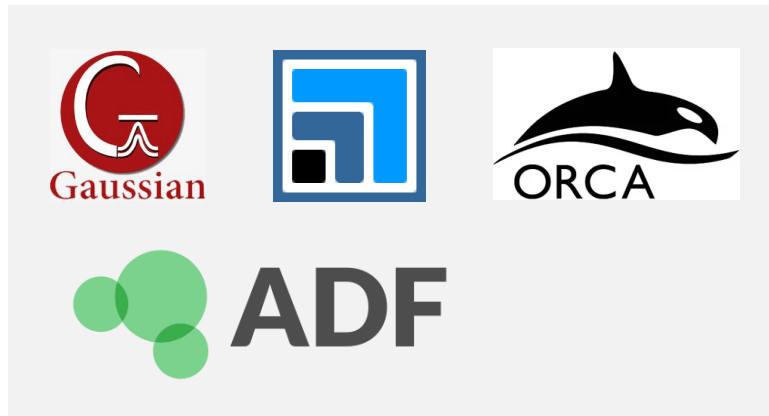
反应机理：

- 有机、无机反应
- 反应机理研究
- 反应路径计算
- 反应热力学、动力学等



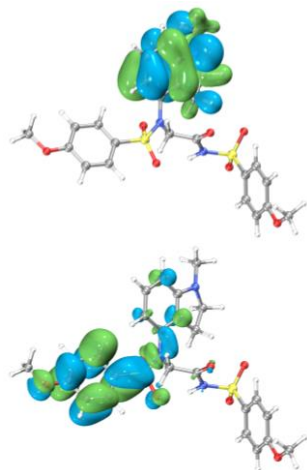
计算软件

Gaussian  
Materials Studio  
ORCA  
ADF等



电子性质：

- 结构优化
- 轨道分析 (HOMO/LUMO)
- 静电势
- 福井函数等



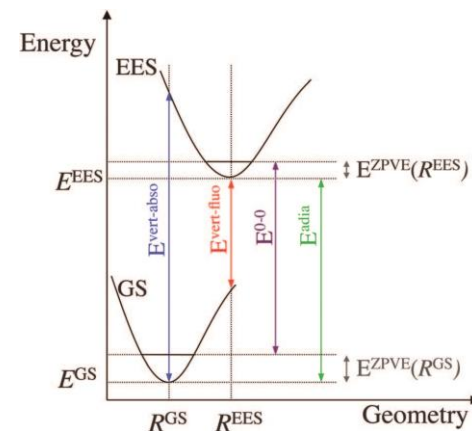
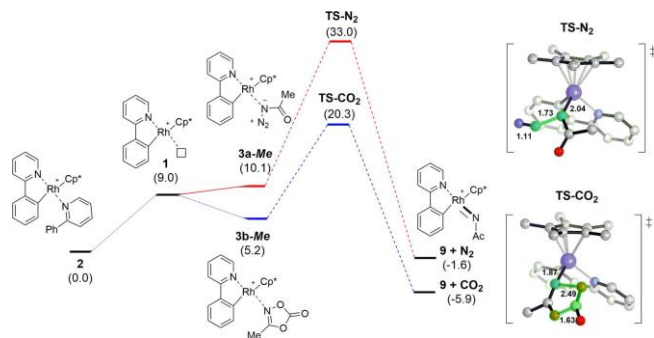


# 多尺度理论计算-量子化学

做计算 找华算

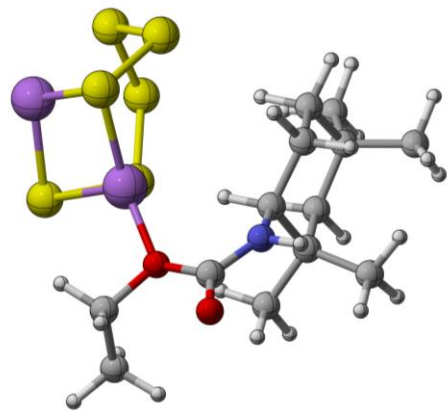
## 过渡态:

- 过渡态结构
- 反应能垒
- 反应机理研究
- 反应路径等



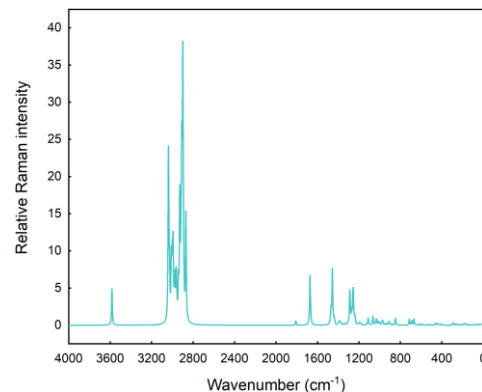
## 激发态:

- 基态、激发态
- 紫外-可见光谱
- 荧光/磷光等
- 重组能



## 相互作用:

- 结合能
- 作用位点
- 作用机理
- 结合构型等



## 光谱预测:

- 红外光谱
- 拉曼光谱
- 电子圆二色谱
- NMR核磁谱等

# 多尺度理论计算-分子动力学

做计算 找华算

分子动力学 (Molecular Dynamics) 模拟是一套分子模拟方法，是研究凝聚态系统的有力工具。通过分子动力学模拟，可以得到体系原子的运动轨迹，能够观察到原子运动过程的各种微观细节。

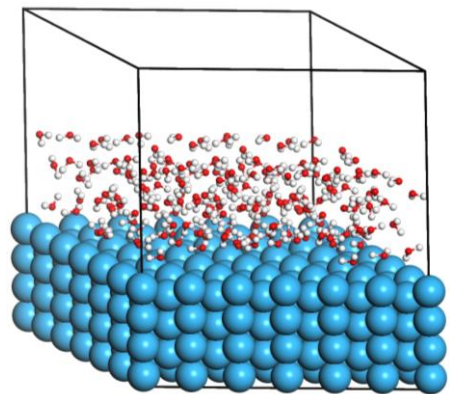


## 计算软件

Gromacs  
LAMMPS  
Materials Studio  
CP2K等

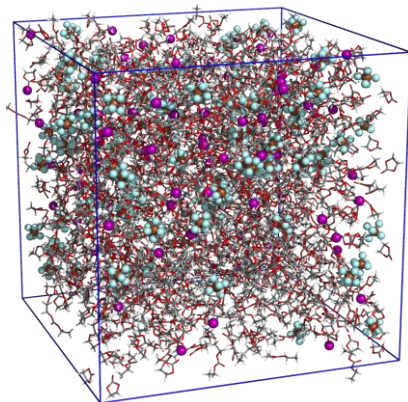


## 计算方案包括但不限于：



### 多相体系：

- 气液界面
- 固气界面
- 固液界面等

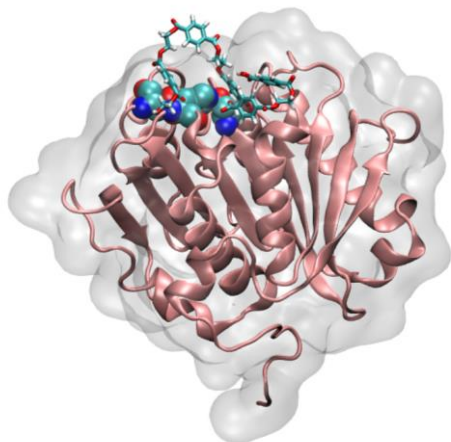


### 均相体系：

- 电解质溶液
- 金属
- 离子液体

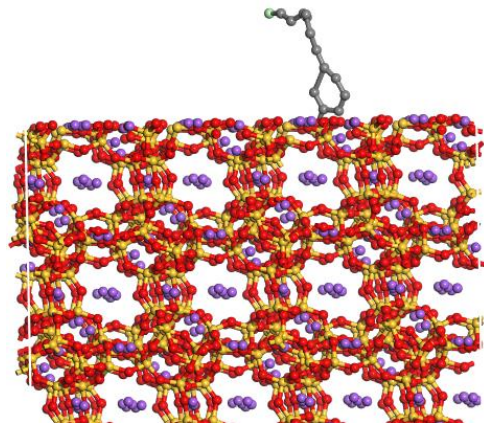
# 多尺度理论计算-分子动力学

做计算 找华算



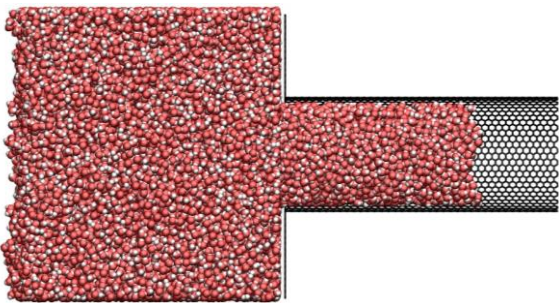
## 生物大分子:

- 分子对接
- QM/MM
- 粗粒化动力学模拟
- 蛋白/DNA/生物膜等



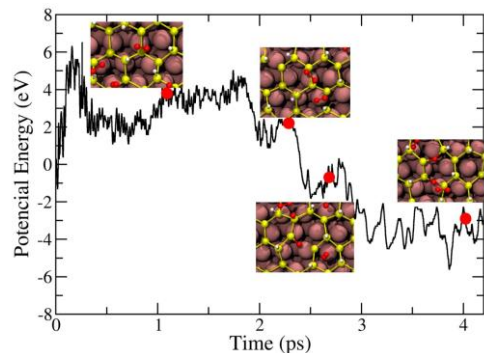
## 吸附体系:

- 多孔材料体系
- 岩土材料体系
- 分离膜体系
- 胶体体系



## 扩散体系:

- 气体分子扩散
- 液体分子扩散
- 金属体系
- 界面扩散等



## AIMD:

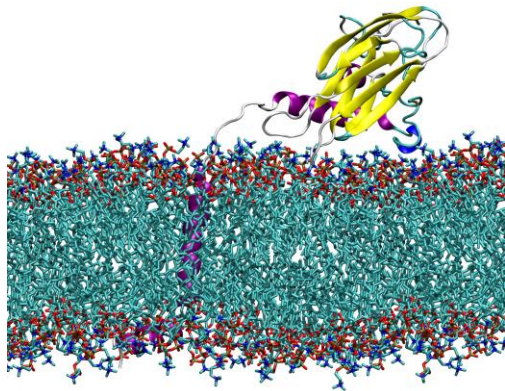
- 从头算分子动力学
- 非晶结构
- 离子迁移过程
- 化学反应过程等

# 多尺度理论计算-生物模拟

做计算 找华算

分子动力学在生命科学领域应用，如生物大分子的模拟，包括蛋白质、DNA、生物膜。通过对研究体系的动态模拟，能够在分子水平上理解生物大分子的运动与生物功能、蛋白-小分子之间相互作用机理等。

计算方案包括但不限于：



分子动力学模拟：

- 配体-受体相互作用
- 小分子结合自由能
- 蛋白结构优化等

计算软件

Gromacs  
Gaussian  
Amber  
Discovery Studio  
AutoDock等

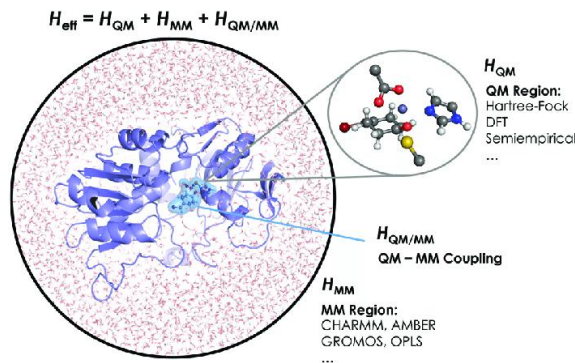
FAST. FLEXIBLE. FREE.  
**GROMACS**



**Amber**



**DISCOVERY STUDIO**



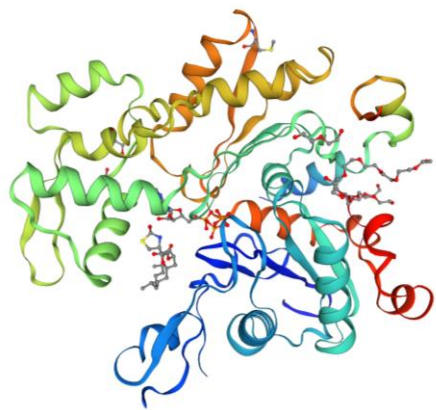
QM/MM：

- 酶催化机理，过渡态历程
- 质子转移、电荷迁移反应过程
- 诱导发光机理等



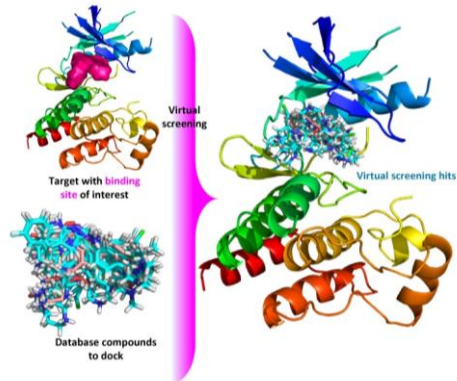
# 多尺度理论计算-生物模拟

做计算 找华算



## 同源建模:

根据模板蛋白将一级序列转成3D结构。在蛋白质序列一致性大于30%的前提下，未知结构的蛋白质可利用一个或多个与之相关的结构来构建其三维结构。



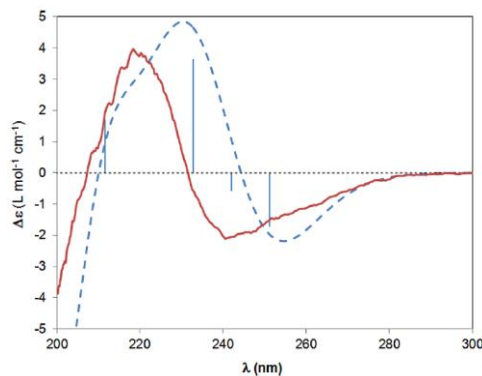
## 虚拟筛选:

基于药物设计理论，借助计算机的技术和专业应用软件，模拟目标靶点与候选药物之间的相互作用，快速地从上百万分子中挑选出具有潜力的先导化合物。



## 分子对接:

基于结构的药物设计方法，通过研究有机小分子配体与生物大分子受体相互作用，预测其结合模式和亲和力。



## 电子圆二色谱(ECD):

ECD对分子基团的空间取向非常敏感，能够提供手性分子的三维结构信息。通过含时密度泛函理论 (TD-DFT) 模拟计算手性分子的ECD，应用于确定手性化合物分子的绝对构型。

# 多尺度理论计算-有限元仿真

做计算 找华算

有限元法是将连续体视为若干个有限大小的单元体的离散化集合，以求解连续体热、力、电磁问题的数值方法。通过有限元方法进行数学建模和计算机求解来模拟各种物理、化学过程，具体包括力学、流体、电磁学、光学、声学、电化学、半导体等多个领域。

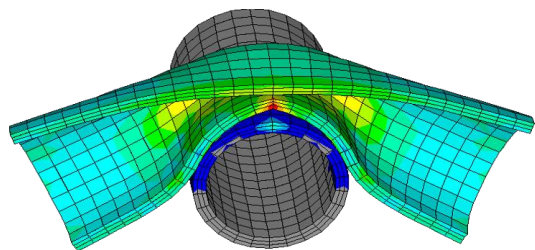
## 计算软件

COMSOL  
Ansys  
ABAQUS等

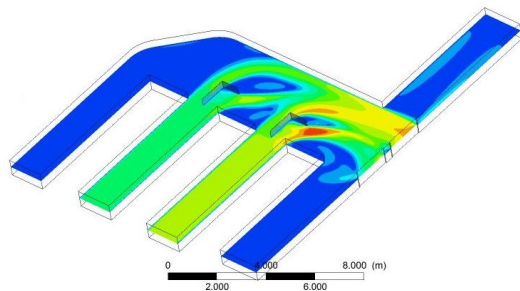
COMSOL

Ansys ABAQUS

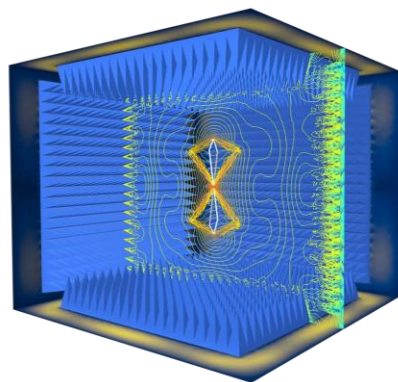
力学



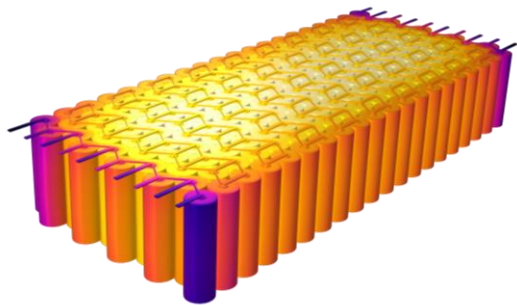
流体



电磁



化工



# 客户与服务

做计算 找华算

华算科技与国内外600多家高校合作了超过10000项理论计算工作，部分客户如下：



## 服务优势



### 费用透明合理

基于工作量合理报价，拒绝黑箱操作



### 专业技术支持

全职计算团队全程跟进，一对一技术服务



### 贴心无忧售后

计算数据终身质保，为实验结果锦上添花



# 联系我们

多尺度理论计算解决方案



13129551561

做计算 找华算

## 联系我们

CONTACT US

固话: 0755-26907854 (09:00~21:00)

邮箱: kefu@v-suan.com

地址: 深圳市南山区众冠时代广场A座3201

官网: <https://lab.v-suan.com>