

图 2 分子结构枚举的高通量设计

分子结构枚举实战

接下来，我们以文献 Nature Energy, 2020, 5(4): 291-298.文献中，设计更安全新型电解液溶剂为例，说明如何利用 MatCloud+ 进行分子结构枚举建模。

研究背景：电池的电压与电池的安全性主要受到电解质材料的限制。当前锂离子电池中的电解质溶剂，依然使用的是 1990 年代初锂电池刚刚商业化时的溶剂，近 30 年来，电解质的溶剂一直没有改变。所以设计合理的新型溶剂可以有效地提高电池的安全性能。

文献设计了新的电解质溶剂，采用分子模拟研究发现新的电解质溶剂具有更宽阔的电化学窗口，之后通过实验也证实了新电解质溶剂可以将电池电压从原来的 3.8 V 增加到 4.6 V，提高了电池的高压工作稳定性，同时还延长了电池寿命。

本例包括以下内容：

- (1) 上传结构模型
- (2) 创建分子结构枚举计算 workflow
- (3) 设置分子结构枚举计算参数并提交计算
- (4) 计算结果查看

(1) 上传结构模型

MatCloud+ 平台会自动转变上传格式，因此支持 cif、POSCAR、mol、pdb 等多种格式文件，本例将碳酸亚乙酯基体和一系列取代基 (zhuti.mol, peiti1.mol, peiti 2.mol) 从本地上传到平台数据库。



图 3 MatCloud+ 上传结构

(2) 创建分子结构枚举计算 workflow

MatCloud+ 平台可以轻松的实现扩胞、取代、吸附等建模操作。本例与之前的建模操作不同的是，不需要【通用导入组价】，只需将组件【分子结构枚举】拖至右边的 workflow 设计页面即可完成高通量模型构建。



图 4 MatCloud+分子结构枚举建模 workflow

(3) 设置分子结构枚举计算参数并提交计算

1) 设置主配体连接位点

在数据库页面，点击选中结构的最右侧[查看]按钮进入结构操作页面。点击[连接位点]按钮，给主配体结构设置接枝位点。注意，主体结构可以有多个接枝位点，但是可以有多个配体结构，每个配体结构只能有一个接枝位点。

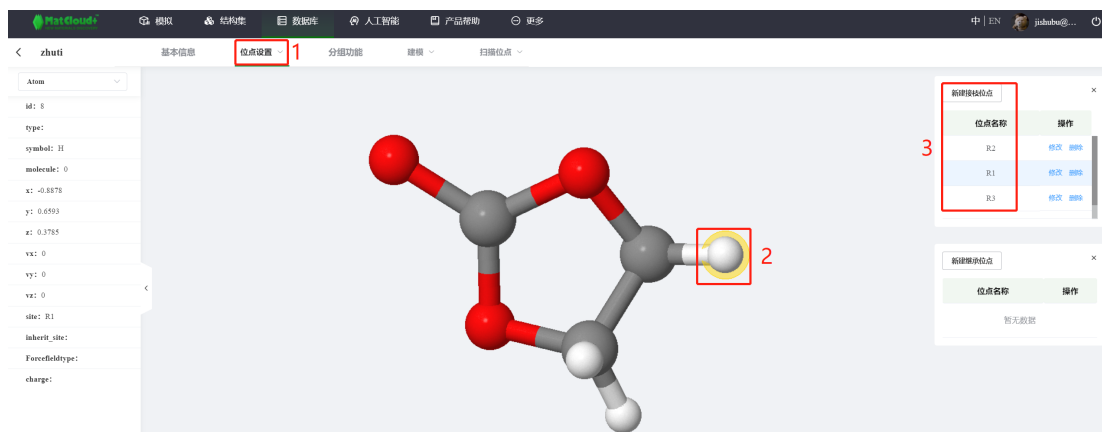


图 5 主配体连接位点设置

2) 主配体连接参数设置

为主体的不同位点设定连接不同的配体，此例我们为主体的 4 个接枝位点连接两个配体。

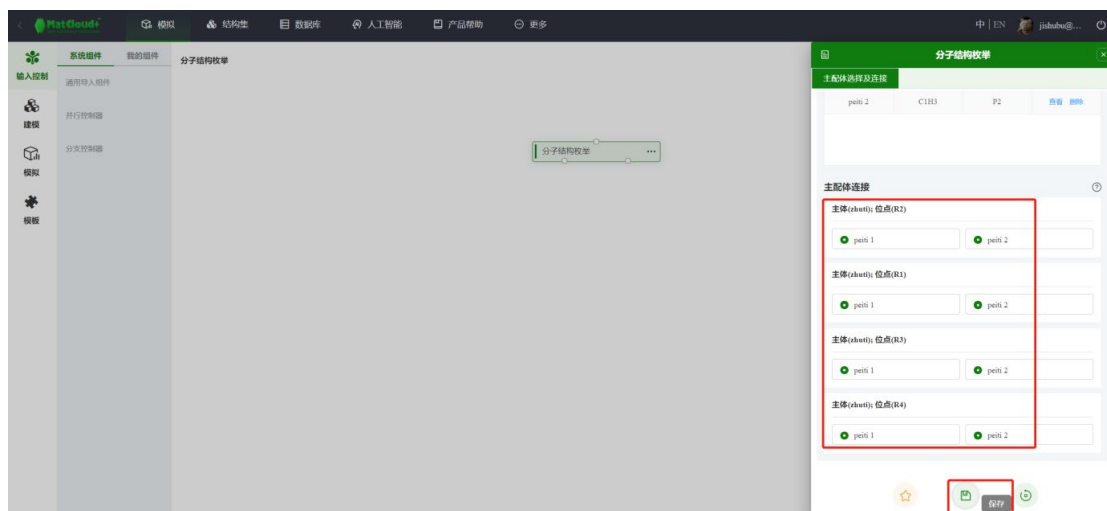
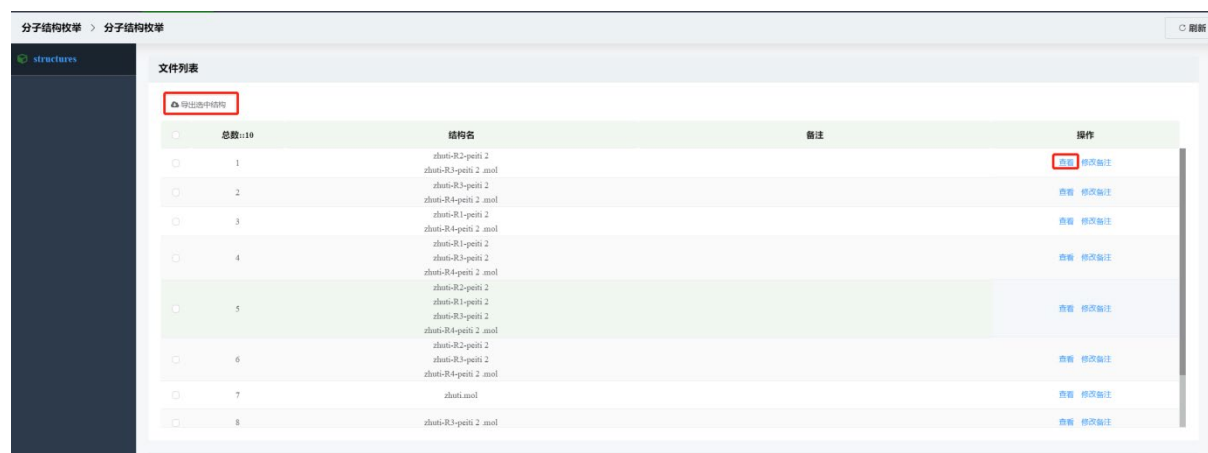


图 6 主配体连接参数设置

(4) 计算结果查看

展示所有的分子枚举结构，并支持查看、多种方式导出结构文件。



文件列表			
导出为文件			
总数:19	结构名	备注	操作
☐	1	zhuti-R2-peciti 2	查看 修改备注
☐	2	zhuti-R3-peciti 2	查看 修改备注
☐	3	zhuti-R4-peciti 2	查看 修改备注
☐	4	zhuti-R1-peciti 2	查看 修改备注
☐	5	zhuti-R4-peciti 2	查看 修改备注
☐	6	zhuti-R1-peciti 2	查看 修改备注
☐	7	zhuti-R3-peciti 2	查看 修改备注
☐	8	zhuti-R4-peciti 2	查看 修改备注

图 7 分子结构枚举结果

Reference:

[1] Zheng Q, Yamada Y, Shang R, et al. A cyclic phosphate-based battery electrolyte for high voltage and safe operation[J]. Nature Energy, 2020, 5(4): 291-298.

分子结构枚举的高通量建模，您学会了吗？当科研领域的“地基”搭建好后，我们便可以搭建“美观、坚固、高档的房子”啦~

接下来，就可以利用“分子枚举”生成的候选结构，开展高通量材料计算筛选。

高通量分子结构枚举建模+高通量计算筛选—案例：

设计高性能新材料的过程：我们通常会对多个材料进行相同的处理及性能表征，通过一系列指标进行材料筛选。如下的工作为四种不同的锂盐选择合适的溶剂：搭建 81 个锂盐溶剂分子，利用计算模拟预测不同溶剂下四种锂盐的物理性质（锂盐溶解度、离子电导率、电化学稳定性窗口、电解液粘度、闪点和沸点），先于实验高通量高并发筛选性能优异的候选溶剂，提高研发效率。

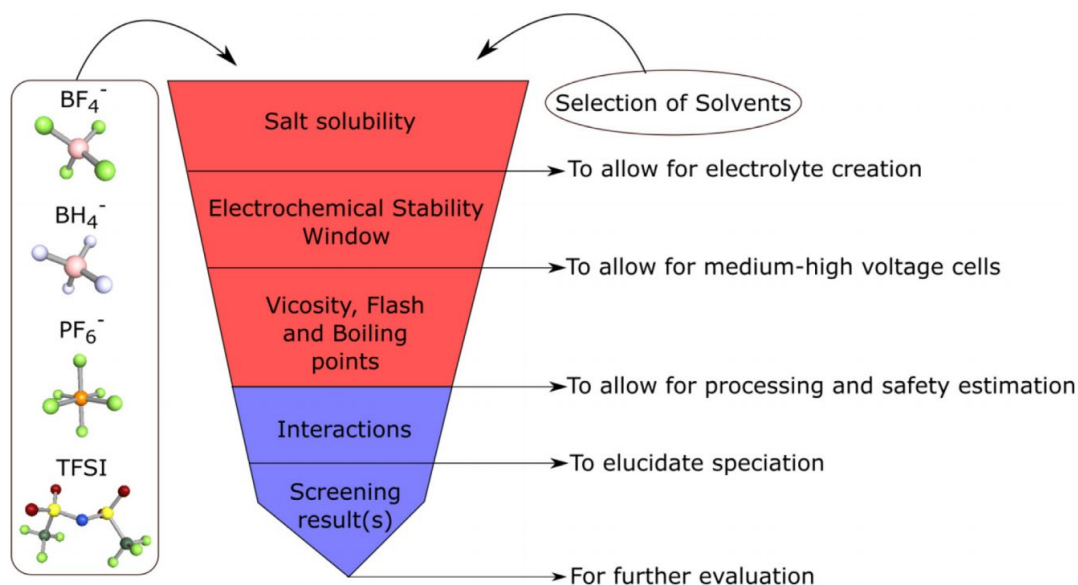


图 8. 电解液配方筛选策略

高通量分子结构枚举建模+高通量模拟—实战：

MatCloud+重新定义了量子力学、分子力学动力学等计算机软件的操作方式，将软件功能组件化，支持拖拽式编程，将功能组件连接成工作流，实现高通量高并发计算。更对复杂的计算流程进行整合开发，直接以性质预测模板（如粘度、氧化还原电位、溶解度等）的形式呈现，用户直接拖拽调用模板，即可实现相应功能，极大简化计算流程步骤，如下为氧化还原电位模板示例。

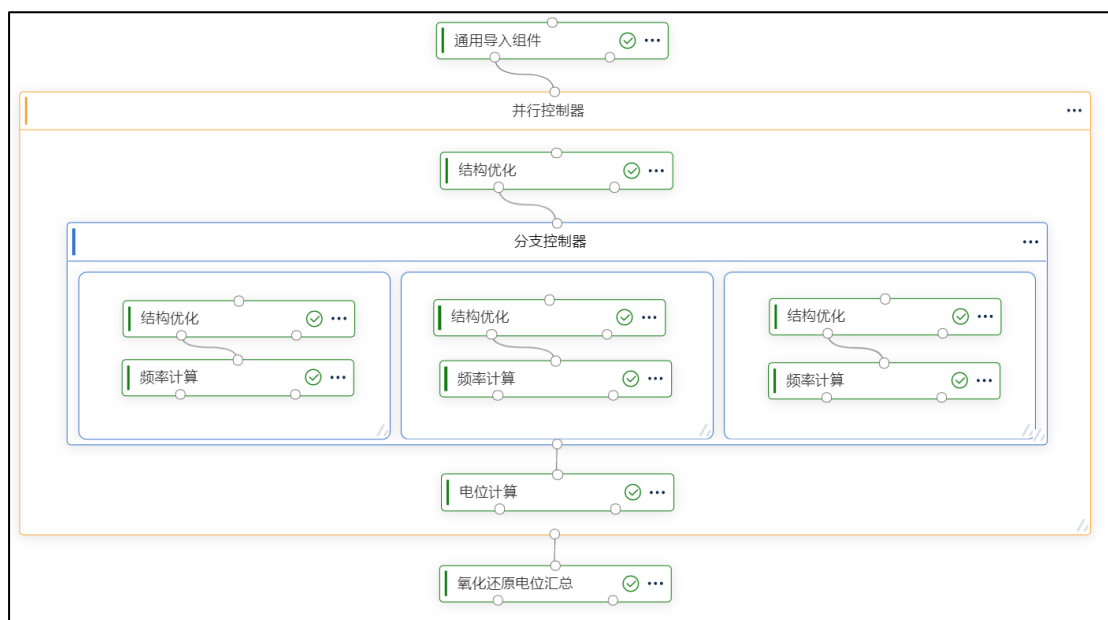


图 8. 电解液配方筛选策略

分子的氧化还原电位可以作为筛选其化学活性的重要依据。MatCloud+平台可以实现不同条件下（氧化态、中性态、还原态）分子能量的计算，并集成了数据后处理功能，直接输出相应的结果并支持对计算数值排序，筛选满足需求的结构。

氧化还原电位			数据
Structure	Reduction Potential (eV)	Oxidation Potential (eV)	
EC-R2-F EC-R4-F	----	7.7973	
EC	-0.0799	6.7304	
EC-R4-P4 EC-R3-F	0.2777	6.0332	
EC-R2-F EC-R4-P4-R1-F	----	5.886	
EC-R2-F EC-R4-P4 EC-R3-P4	0.2099	5.8721	
EC-R1-P4-R1-F EC-R3-P4-R1-F	0.0603	5.7762	
EC-R1-P4-R1-F EC-R3-P4	-0.0357	5.7055	
EC-R4-P4-R1-F EC-R3-P4-R3-F P4-R1-F	1.3212	5.5798	

图 9. 氧化还原电位结果汇总

MatCloud+的高通量建模+高通量计算筛选功能，大大提高了研发效率。值得注意的是建模功能是免费使用的哦，如此实用的功能，大家还不赶紧用起来！

更多 Matcloud+教程可关注 **b 站迈高科技**。

更多动态请关注**迈高科技**微信公众号

