项目需求书

1.天津城建大学购置材料设计与性质预测平台1套。

2.本项目允许进口产品投标，同时也接受满足需求的国内产品参与竞争。

3.本次招标的所有产品均要求至少提供一年免费全质保，终身维护。保修期自货到验收合格之日开始计算。

4.所有产品必须是全新产品，出厂日期在到货日期前1年以内。

5.技术参数要求

具体技术参数要求详见下列采购产品配置清单一览表。

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 序号 | 设备名称 | 详 细 技 术 指 标 及 参 数 | 单位 | 数量 |
| 1 | 材料设计与性质预测平台 | 1.能够在Windows界面下创建模型、设置参数、进行可视化结果分析等工作。能够通过浏览器界面查看计算过程及结果。能够创建分子、晶体、表面、吸附、掺杂聚合物、纳米结构等各种基础模型。  2.具有COD晶体数据库及其用户图形界面。  ★3.能够基于量子力学和平面波基组进行几何和电子结构计算。具有全部元素的多种PAW贋势。支持LDA、GGA、杂化（HSE06等）、范德华泛函（optB86b-vdW等）。  4.能够对体系进行几何结构优化，获得稳定构型，包括键长、键角、晶格常数、原子位置等。  5.能够计算体系的总能量、原子受力、电子性质、状态方程、弹性常数、玻恩有效电荷、静态介电张量、压电张量、介电函数、磁矩、频率等性质。  6.能够进行DFT+U计算，支持非共线磁性和自旋轨道耦合计算。  ★7.支持从头分子动力学（MD）计算，对MD的每一步都采用有效矩阵对角方案和有效Pulay混合求解瞬时电子基态，支持NVT和NVE。  8.支持激发态完全含频GW计算，速度达到等离子极点模型。  9.支持Screened Exchange和Hartree-Fock等非局域相互作用方法。  ★10.能够进行分子动力学相关模拟计算。具备各种适用于有机分子、半导体、金属体系、无机化合物的先进力场。  11.能够计算材料的力学性质（弹性常数和弹性模量）、声速、德拜温度、基于德拜模型的多种热力学性质并进行力学稳定性分析。  12. 能预测粒子对表面连续冲击，可控制粒子在表面的反应及相互作用，能够实现自动化模拟，便于用户检查动态计算过程。 | 套 | 1 |