

# MedeA 软件招标技术参数和要求

## 一、基本功能要求

- 1.1 可创建各种材料模型， 提供多种材料模拟方法。
- 1.2. 能够直接预测材料多种理化性质、对计算结果可视化分析。
- 1.3. 可利用 Flowchart 功能简化整个工作流程。

## 二、技术参数

- 2.1 具有 COD 晶体数据库。可以创建分子、晶体、聚合物、表面等各种模型。能够在 Windows 界面下创建模型、设置参数、处理结果等工作。
- \*2.2 能够基于量子力学对材料体系的几何和电子结构进行第一性原理计算。基于平面波基组和 PAW（投影缀加波）赝势计算材料的能量、光学、磁学等多种理化性质。具有全部元素的多种 PAW 赝势。支持 LDA、GGA、杂化、范德华泛函。
- \*2.3 提供 VASP 程序的用户图形界面，能够在 Windows 界面下设置 INCAR、POSCAR、POTCAR 及 KPOINTS 等输入文件。
- 2.4 能够采用 LAMMPS 程序进行分子动力学相关模拟计算。具有用户图形界面，能够在 Windows 界面下设置所有计算参数。具备各种适用于有机分子、半导体、无机化合物及金属体系的先进力场。
- \*2.5 能够计算材料的力学性质、进行力学稳定性分析。能够使用多种平均法（Voigt、Reuss、Hill）预测体系的体模量、剪切模量和杨氏模量。

## 三、技术服务

### 3.1 安装

软件制造商授权的技术人员现场安装调试，软件技术指标经验收合格，附验收报告。

### 4.2 保修

要求由软件制造厂提供一年免费保修服务。

### 3.3 培训

现场培训:需提供软件使用现场培训，培训时间为二天，不限参加人数。

**四、交货期：** 合同签订后 90 天内。

**五、数量：** 1 套。

**六、交货地点：** 中国地质大学（北京）用户指定地点。