



Lithium battery materials

锂电池材料 研究设计解决方案

全功能材料设计及性质预测平台MedeA



Lithium battery
materials

关于源资科技

源资信息科技（上海）有限公司于公元2008年5月在上海交通大学产学合作的白猫科技园区内正式成立，并隶属于上海张江国家自主创新示范区的长宁分园。公司已于2015年通过ISO9001质量体系认证，于2018年荣获“高新技术企业称号”，于2020年荣获“专精特新中小企业称号”。

公司以协助国内材料、化工、医药等领域的发展为宗旨，以创新的理念，为材料模拟、制药研发、临床试验设计及信息和质量管理等各个领域提供连贯整合性平台解决方案。自成立之日起，公司积极组织参与材料相关领域的各种学术交流活动，以技术培训班、研讨会、在线教育、展会报告等多种方式，不断将世界范围内更新的理念，更优秀的解决方案引进中国。公司成立至今，受到了教育、学术和企业界人士的广泛肯定和赞赏。

公司于2013年9月1日正式取得Materials Design®公司VASP及MedeA软件的独家代理权。公司将为国内材料信息学这个新兴领域的科研工作者提供最大的支持和最优质的服务，帮助科研工作者们只专注于科学研究。

关于Materials Design®

Materials Design®公司由材料科学领域的知名带头人Paul Saxe博士创建于1998年，总部位于美国，并在欧洲和澳大利亚设有分公司，能够给予用户全球化的视角和快速响应的服务。

Materials Design®公司致力于将计算材料科学与实验中获得的结构数据库整合成一个全功能材料设计与性质预测平台，结合学术界中最权威的第一性原理、分子动力学、蒙特卡洛和半经验量化这几种计算方法为解决材料设计、化工生产、工业应用、基础研究等几大领域中实际存在的科学与工程问题提供了便利。目前，致力于推动计算材料科学的公司不多，Materials Design®公司作为其中之一，利用强大的数据库与计算模拟方法，帮助提升已有材料的国际竞争力，同时探索和开发新材料。Materials Design®公司旨在与全球范围内学术及工业界紧密合作，共同为人类的未来生活提供更好的材料。

The Gateway to Atom-Scale Simulation ▶▶▶

锂电池材料研究设计解决方案

MedeA是一个全功能材料设计及性质预测平台软件,其包含数据库、建模工具、多尺度计算引擎、多种理化性质预测工具等模块。



材料制备

自由能和相图: 混溶性与分散性 力学性质 (弹性、延展性, 脆性, 硬度) 介电常数 压电效应 扩散率 热膨胀 热容 电子结构

循环行为, 快速充电

离子导电率 电子导电率 导热率 电化学稳定性与降解 相变 颗粒的体积变化 金属镀层

电极, 电解质, 涂层, 粘结剂的界面

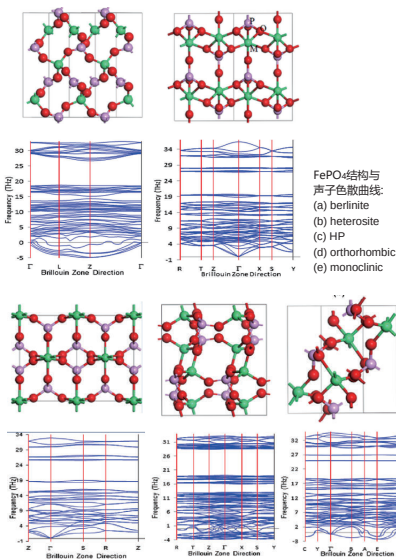
界面处的形态结构 界面接触 电流密度 互扩散 & 偏析 界面稳定性/分层 电势分布

谱图分析

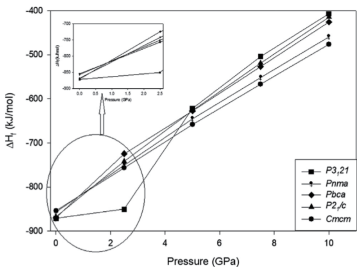
XRD预测 IR/Raman光谱 UV-Vis光谱 XPS (核能级位移) NMR (化学位移, 场梯度, 顺磁位移)

MedeA在锂电材料中的应用案例：正极材料

◦ 正极材料FePO4不同晶型结构、力学、声子性质研究



	Berlinite (P3 ₁ 21)	Heterosite (Pnma)	Orthorhombic (Pbca)	Monoclinic (P2 ₁ /c)	HP (Cmcm)
a (Å)	5.11 (5.1) ^a	9.87 (9.8) ^a	8.78 (8.7) ^a	5.56 (5.5) ^a	5.26 (5.5) ^a
b (Å)	11.4 (11.3) ^a	5.82 (5.8) ^a	9.23 (9.2) ^a	7.49 (7.5) ^a	7.85 (7.8) ^a
c (Å)	11.4 (11.3) ^a	4.82 (4.8) ^a	9.24 (9.4) ^a	8.11 (8.1) ^a	6.34 (6.3) ^a
V (Å ³)	257.2 (252.5) ^a	277.2 (271.7) ^a	773.3 (752.3) ^a	335.8 (328.5) ^a	261.8 (257.1) ^a
ΔH _f (kJ/mol)	~871.34 (~1207.56) ^a	~856.54 (~1279.23) ^a	~870.27	~867.76	~854.89
G ₀ (GPa)					
C ₁₁	70.00	251.33 (175.9) ^a	49.00	145.50	249.68
C ₁₂	24.75	81.56 (23.6) ^a	43.02	84.58	66.67
C ₁₃	40.25	88.67 (54.0) ^a	0.92	90.58	28.08
C ₂₂	~9.50				
C ₃₃		242.05 (153.6) ^a	96.17	21.08	186.53
C ₄₄		43.33 (19.6) ^a	25.42	132.17	44.58
C ₅₅		95.00 (47.5) ^a	16.00	66.50	
C ₆₆		89.07 (55.6) ^a	23.07	148.17	
C ₁₁	92.00	204.69 (135.0) ^a	35.33	6.92	144.01
C ₁₂	29.50	73.33 (38.8) ^a	16.67	13.08	90.00
C ₁₃				57.33	
C ₂₂				9.00	
C ₃₃				47.00	61.33
C ₄₄				38.33	73.67
C ₅₅				30.46	91.52
C ₆₆				96.1	92.5
B ₁₁	22.62	94.92 (73.2) ^a	2.54	38.7	77.8
B ₂₂	47.8	71.9 (73.6) ^a	26.7	102.5	173.1
B ₃₃	23.1	97.7 (51.4) ^a	16.5	2.48	1.27
B ₄₄	59.6	136.5 (125.0) ^a	40.8		
B ₅₅	2.04	1.25 (1.4) ^a	1.62		

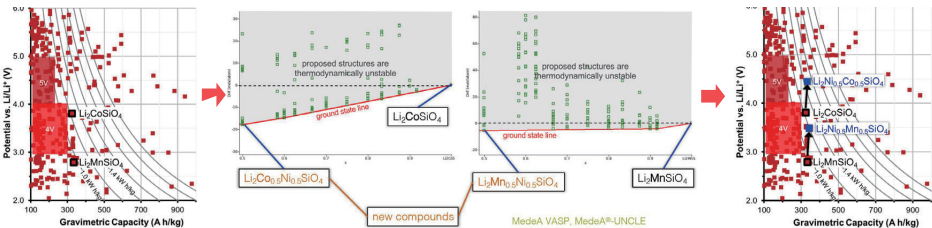


MedeA VASP：计算不同晶型FePO4在不同压力下的生成热，考察稳定性

MedeA VASP + MedeA MT：预测不同晶型FePO4的力学性质，考察稳定性

MedeA VASP + MedeA Phonon：预测不同晶型FePO4的声子性质，考察稳定性

◦ 高通量筛选高能正极材料

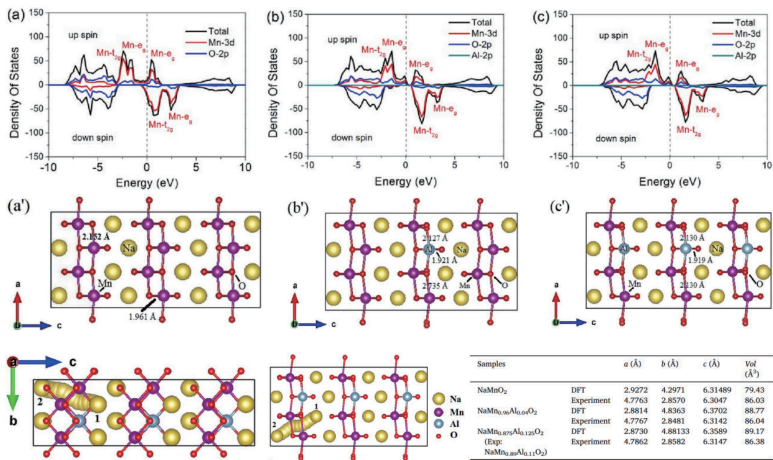


MedeA VASP + MedeA Hightthroughput：高通量筛选高能正极材料

MedeA VASP + MedeA UNCLE：预测不同Ni比例下的基态相图，确定最稳定结构

MedeA在锂电材料中的应用案例：正极材料

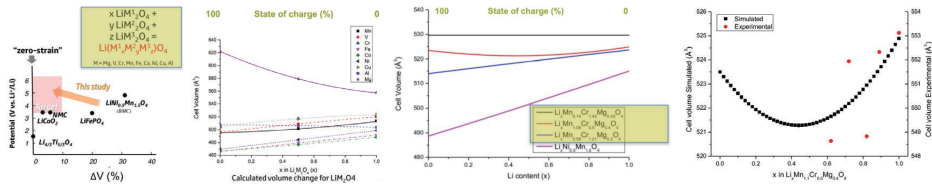
◦ 钠离子电池正极材料β-type NaMn_{1-x}Al_xO₂



MedeA VASP：优化NaAl_xMn_{1-x}O₂ (x=0,0.04,0.11) 结构，研究Al掺杂后晶格参数变化并计算电子性质。
MedeA Transition State Search (TSS)：分析Na在NaMn_{0.875}Al_{0.125}O₂中扩散路径。另外，结合体积及键长变化，可知NaAl_xMn_{1-x}O₂(x=0,0.04,0.11)结构的总体积增加，这将有助于钠离子自由扩散，且不会产生明显晶格畸变。

*参考文献：Debasis Nayak. et al., Journal of Power Sources 438 (2019) 227025.

◦ 固态锂离子电池中的低应变正极材料设计

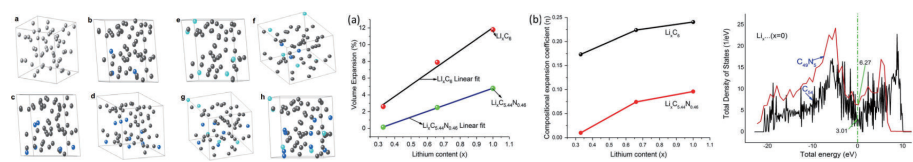


MedeA VASP + MedeA High Throughput：利用从头计算筛选具有尖晶石结构 (Li₂M₂O₄) 的各种氧化物材料，优化其体积变化、锂的电化学势。选择三种金属来设计低应变材料：Mg控制体积变化量、Mn提供结构稳定性、Cr 补偿 Mg带来的电化学惰性。计算表明，Mg 与其他过渡金属不同，随着Li离子嵌入，能够进行体积补偿。当Mg含量增加时，体积的补偿作用也越明显。同时结合实验进一步验证计算合理性。

*参考文献：Joint work with Toyota Motors Europe (2016) Patent WO2014191018 A1 with Materials Design® as co-author.

MedeA在锂电材料中的应用案例：负极材料

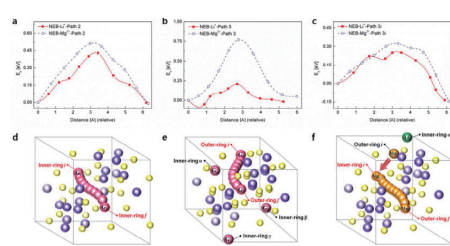
◉ N 掺杂对硬碳材料体积膨胀及锂存储容量影响



MedeA-VASP: 模拟未掺杂及掺杂 N 原子的硬碳材料锂化过程。计算表明掺杂 N 原子之后，负极材料的膨胀系数急剧降低，容量维持能力增强，Li 离子容量增加；其次，电导成倍提高，材料的电子传输能力提升。

*参考文献: Ashutosh Agrawal, et al., Journal of Solid State Electrochemistry, 2018.

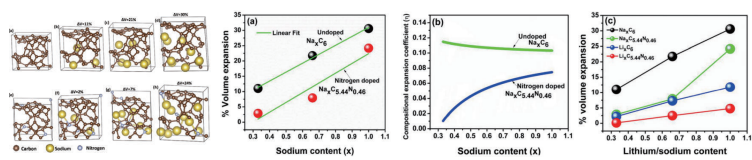
◉ Mg^{2+}/Li^{+} 双阳离子在 Mo_6S_8 中输运性质理论研究



MedeA VASP + MedeA Transition State Search (TSS): 研究 Mo_6S_8 结构中阳离子输运性质。考察不同扩散路径在 Mo_6S_8 中的离子位点，同时计算 Li^{+} 、 Mg^{2+} 、 Mg^{2+}/Li^{+} 双阳离子扩散能垒以及运动轨迹。

*参考文献: Jae-Hyun Cho, et al., J. Am. Chem. Soc. 2017, 121, 12617-12623.

◉ N 掺杂钠离子电池负极材料的电化学性能研究



MedeA-Forcefields: 用REBO势函数描述硬碳模型中的原子相互作用。

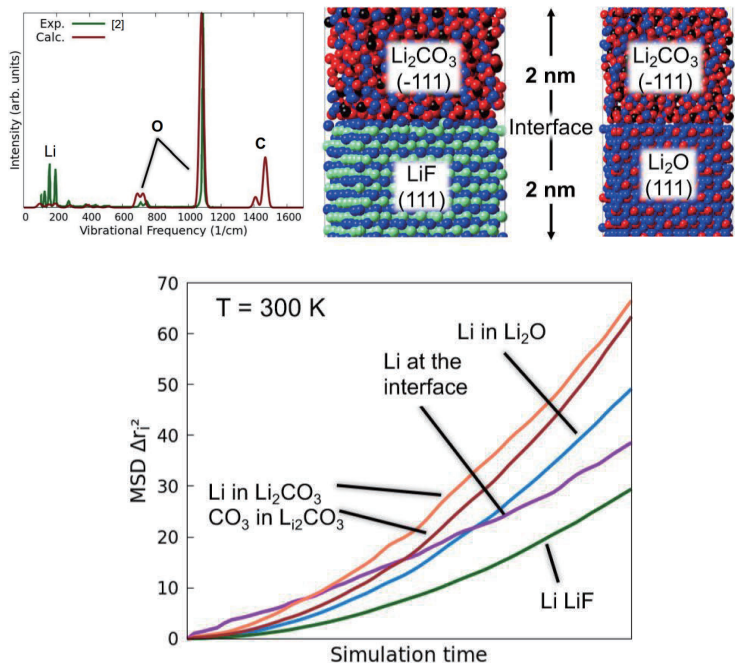
MedeA-LAMMPS: 分子动力学程序对硬碳液体进行淬火，得到了实验条件下的硬碳模型。

MedeA-VASP: 计算N掺杂硬碳负极材料钠化过程中的体积膨胀系数，从而探究N掺杂对负极材料电化学性能的影响，为材料制备以及电化学性能改善提供了理论依据。

*参考文献: Agrawal A, et al., Electrochimica Acta, 2019, 317(164-172).

MedeA在锂电材料中的应用案例：界面研究

◉ 固态电解质膜（SEI）结构、力学、Li离子扩散行为研究



Material	Bulk Modulus (GPa)	Shear Modulus G (GPa)	Pugh's Ratio B/G >1.75 → ductile	
LiF cubic	75 (Exp. 63--93) ^[1]	47	1.6 brittle	< 10 ⁻³² [3]
Li ₂ O cubic	77 (Exp. 57--90) ^[1]	65 (Exp. 70) ^[2]	1.2 brittle	< 10 ⁻¹⁷ [4]
Li ₂ CO ₃ monoclinic	60	33	1.8 ductile	< 2 10 ⁻⁵ [5]
SEI			> 1.75 ductile	

MedeA VASP + Phonon: 预测IR/Raman 光谱

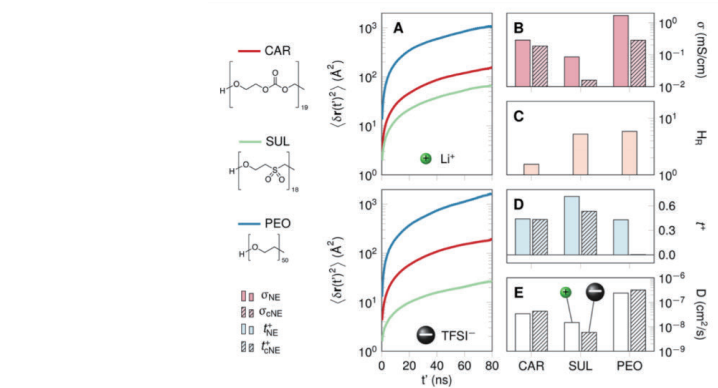
MedeA Interfaces Builder: 构建SEI界面模型

MedeA LAMMPS + MedeA Diffusion: 预测Li离子在SEI中的扩散行为

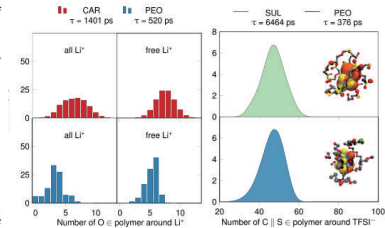
MedeA LAMMPS + MedeA MT: 预测SEI的力学性质

MedeA在锂电材料中的应用案例：电解液

◎ 聚合物电解质中Li离子输运性质的分子模拟研究



Polymer	Fragment	Li^+ binding energy (eV)	ESP map	ESP minimum (eV)
PEO		-1.86		-1.92
CAR		-1.99		-1.77
SUL		-2.33		-1.90



MedeA Polymer Builder：创建PEO、SUL和CAR的聚合物结构。

MedeA Amorphous Builder：创建电解质溶液的无定形模型。

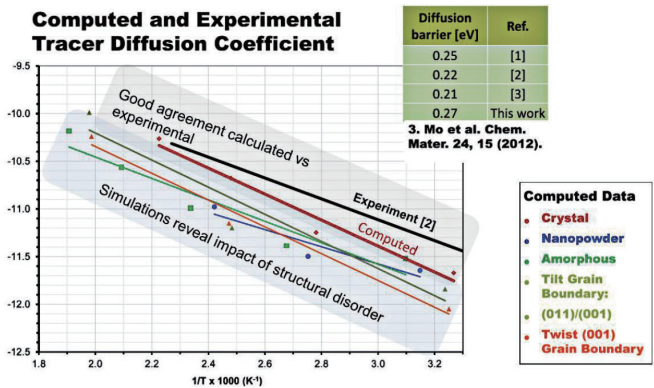
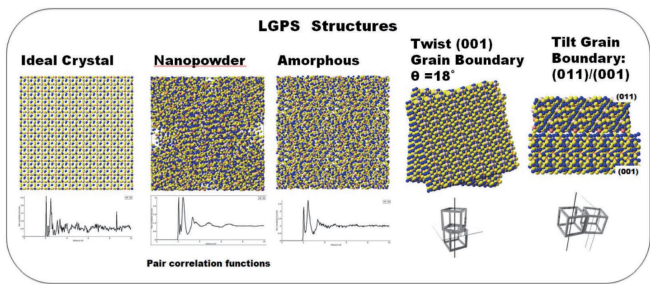
MedeA LAMMPS Diffusion：计算 Li^+ 和 TFSI^- 在各个聚合物中的扩散系数，表明阴离子的扩散速度比阳离子快，阳离子与聚合物链间的强相互作用有效地减缓了聚合物链的速度，阴离子由聚合物松散地协调，表现更高的流动性。

MedeA VASP：利用DFT方法计算了 Li^+ 与各个聚合物分子间的结合能以及电离能，发现SUL- TFSI^- 间的结合能(-0.71eV)是EO- TFSI^- 间结合能(-0.35eV)的两倍。

*参考文献：Arthur France-Lanord, et al., Chem. Mater. 2020, 32, 121–126.

MedeA在锂电材料中的应用案例：固态电解质

◦ 固态电解质LGPS结构对其力学性质和Li离子迁移行为的影响



MedeA Nanoparticle Builder: 构建LGPS纳米团簇结构

MedeA Amorphous Materials Builder: 构建LGPS非晶结构

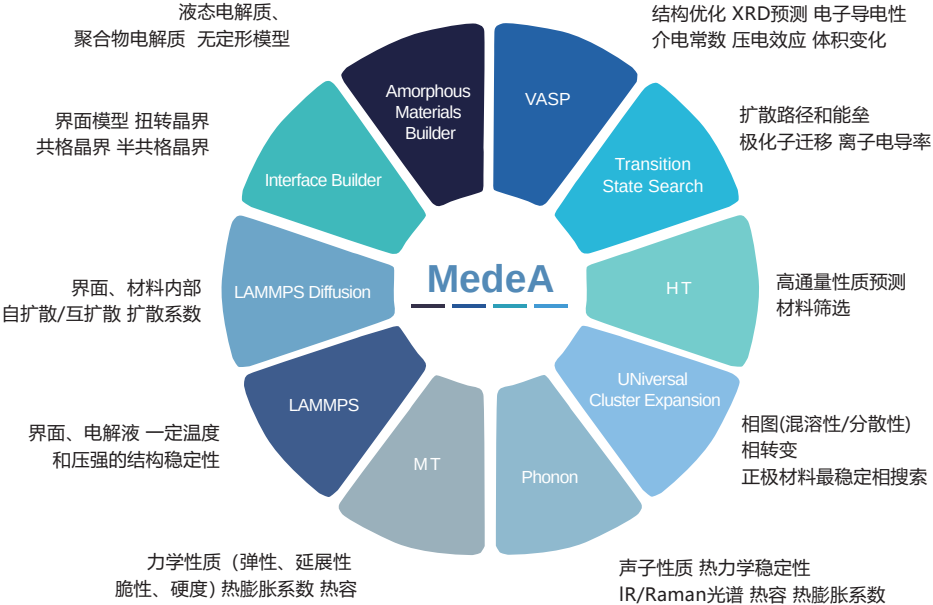
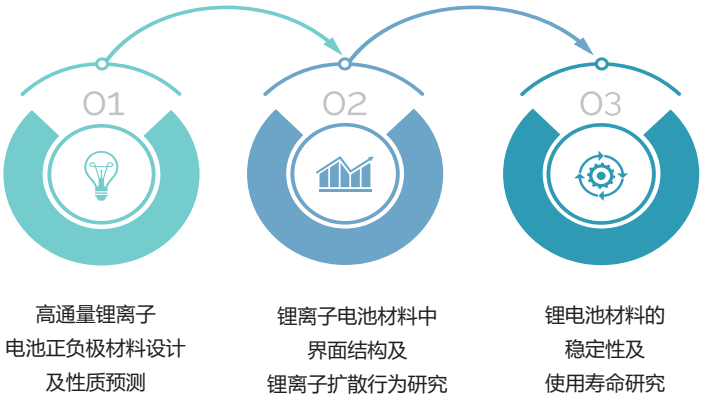
MedeA Interfaces Builder: 构建LGPS扭转晶界结构

MedeA VASP + MedeA TSS: 量子力学尺度下预测Li离子在各种LGPS中的扩散行为

MedeA LAMMPS + MedeA Diffusion: 分子动力学尺度下预测Li离子在各种LGPS中的扩散行为

*参考文献：此案例由Materials Design 公司与TOYOTA公司共同完成

锂电池材料研究设计解决方案



MedeA的硬件需求

Component	Requirement
Operating system	Windows: 7/8/10; Linux: Centos, RedHat, Debian, Fedora, Suse, Ubuntu, Oracle, Mint
Architecture/Processor	Most 64bit architectures from Intel and AMD: Opteron, Ryzen, Zen, Core2, Core2Duo, i5, i7, i9, Xeon. ARM and Power8 are not supported.
CPU speed	Strong floating point performance required. No lower/upper hard limit on clock speed
GPU	NVidia Tesla GPUs with compute capabilities between 3.0 and 7.5 only (Tesla K, P, and V series, QuadroK, P, and GV series, GeForce GTX series, and Titan X and V series)
Memory	1-4 GB RAM per core; 4 GB/core is recommended for VASP
Hard Drive space	6 GB minimum for a full MedeA installation, no lower/upper hard limit for storing user generated data
Graphics	support of OpenGL 2.1 and higher and at least 128 MB of memory
Network	Fast Ethernet, 100 MB or faster
Display	Screen resolution of 1280x800 at minimum, recommended 1920x1080



源资科技-VASP&MedeA在中国的官方代理商
中国地区只授权一家，可提供正规授权函
关注VASP & MedeA官方公众号
回复“试用”，填写表单，申请MedeA试用
联系邮箱support@tri-ibitech.com



进入源资科技-B站视频空间，
观看所有教学视频！
方法1：登录哔哩哔哩网站或APP，搜索源资科技；
方法2：扫描左侧二维码直接观看。

锂电池材料研究设计解决方案

材料制备

自由能和相图：混溶性与分散性 力学性质（弹性、延展性，脆性，硬度）介电常数 压电效应
扩散率 热膨胀 热容 电子结构

电极，电解质，涂层，粘结剂的界面

界面处的形态结构 界面接触 电流密度
互扩散 & 偏析 界面稳定性/分层 电势分布

循环行为，快速充电

离子导电率 电子导电率 导热率 电化学稳定性与降解 相变 颗粒的体积变化 金属镀层

谱图分析

XRD预测 IR/Raman光谱 UV-Vis光谱 XPS（核能级位移）NMR（化学位移，场梯度，顺磁位移）



源资科技(上海)有限公司
电话: +86-21-32504385
网址: www.tri-ibiotech.com
邮箱: support@tri-ibiotech.com

上海总公司
地址: 上海市长宁区天山路18号701室
重庆办事处
地址: 重庆市渝中区石油路大坪时代天街B馆3栋2803

北京分公司
地址: 北京市顺义区安泰大街融慧园15-3
南京维保中心
地址: 南京市玄武区珠江路699号东鼎大厦C座401

