

Table of Contents

软件各个模块中文教程 1

软件各个模块中文教程

- ADF[]专注分子、团簇DFT计算
- BAND[]专业低维材料、分子晶体DFT计算
- Quantum ESPRESSO[]材料物理DFT计算
- ReaxFF[]分子动力学、蒙特卡洛模拟化学反应
- COSMO-RS[]流体热力学性质
- Advance WorkFlow & Tools:
ChemTraYzer[]ChemTraYzer2.0[]ParAMS[]ACE Reaction[]OLED器件
- DFTB[]近似密度泛函
- Zacros[]动力学蒙特卡洛kMC
- Apple&P[]离子体系的分子动力学模拟
- Force Field[]分子力场UFF[]UFF4MOF[]UFF4MOF-II[]GAFF[]Tripos[]Amber[]GAFF[]构像搜索
- AMS引擎驱动ADF[]BAND[]DFTB[]MOPAC[]ReaxFF
- 建模

From:

<https://www.fermitech.com.cn/wiki/> - 费米维基

Permanent link:

<https://www.fermitech.com.cn/wiki/doku.php?id=adf:chinesetutoruialsams>

Last update: **2022/11/16 15:35**