

具体技术规格需求

第一包：MedeA2.22 软件

用途

本科物理化学实验教学、科学研究

详细可量化的技术参数、

1. MedeA2.22 软件，包括建模功能和计算功能；

1、建模功能：

通过 MedeA-VASP 友好的用户界面能够创建分子、晶体、固体、表面、聚合物、无定型材料、纳米结构和材料间的界面结构模型。并且，MedeA-VASP 也提供了强大的数据库支持（近 500,000 条结构数据），包含二元和多元金属相图。通过 MedeA 的数据库管理模块可以对数据库中的数据进行组合条件搜索，并且显示多种几何和相关的性质信息。

2、计算功能：

通过 MedeA-VASP 能够调用 MedeA 平台中的 VASP 模块，完全整合 VASP 量子力学计算模拟程序。MedeA-VASP 平台提供用于 VASP 各种参数设置的 Windows 用户图形界面。通过 JobServer 和 TaskServer 能够在 MedeA-VASP 平台下能够实现串行和并行计算。MedeA-VASP 的 JobServer 能够有序地管理成千上万个计算结果，能够对结果可视化并进行分析。

3、可视化界面：

通过 MedeA-VASP 界面能够对各种模型的结构、晶格参数、键长键角等各种几何结构数据实现可视化观察和操作功能。MedeA-VASP 也可以操作、观察及分析计算前后的结构模型并对模型进行调整。同时，MedeA-VASP 平台也能够对计算结果进行可视化分析，主要包括电子态密度、能带结构、电荷密度、优化轨迹、分子动力学轨迹、光学等多种性质分析。

4、可以计算的性质：

3D 周期结构体系的总能量；体系中原子受力；压力和应力张量；总磁矩；采用能量最小化方法获得平衡晶格常数和原子位置，能带结构，精确能隙，掺杂物能级，基于杂化泛函和 GW 方法获得能带带阶；总电子态密度和分波态密度（对原子与轨道角动量投影）；电子电荷密度和相应的静电势；功函数；自旋密度；磁矩；响应函数，包括压电张量；Born 有效电荷；光谱，即作为频率函数的介电函数、折射率、光学吸收等性质；基础电子性质，有效质量、电导和电导和温差电势率等。

2. 工作条件：Windows 操作系统。

附件、备件及消耗品

无

技术文件

无

设备安装调试

卖方负责在买方现场安装、调试软件并交付使用，自带必要的专用工具，安装、调试及所派人员的一切费用由卖方承担；软件到达买方指定地点后，一周内执行安装调试直至达到验收指标。

技术培训

为买方免费培训使用软件的工作人员，培训内容包括仪器的基本原理、安装、调试、操作使用和日常保养维修等。

售后保修

提供 3 年免费保修，保修期自验收签字之日起计算。保修期满前 1 个月内卖方应负责一次免费全面检查，并写出正式报告，如发现潜在问题，应负责排除。

质保期内，卖方接到买方故障信息后在 2 小时内予以响应，并在 24 小时内到达买方现场，排除故障，免费更换损坏零件和服务。

在软件保修期结束后，保证可以提供及时的售后维修服务，优惠的备件供应。

验收标准

完成软件安装，使用人员能正常操作。

交货地点时间

中国科学院大学雁栖湖校区

30 天

技术支持

在北京有专职维修工程师和技术支持工程师，保证软件的正常使用和技术咨询。

软件升级

卖方应质保期内免费向用户提供软件的更新。

其他要求等

无

付款方式

	人民币设备	外币设备
报价方式	人民币	CIF/CIP 国际通用货币或人民币(不能限制国内厂商)
交货地点	用户指定地点	机场
付款方式	预付 40%，验收合格后付 50%，质保期后付 10%	100%L/C, 90%即期, 10%验收合格后支付

	或者货到付款	
交货期	签订合同后 <u>3</u> 个月内	