

碘到为酯代算、咨询服务手册

(更新于 **2025.12.1**)

目录

一：概况	1
二：计算费用参考	2
2：能量、性质、光谱的计算	2
3：势能面与过渡态搜索	3
4：激发态计算	3
5：波函数分析	3
5：第一性原理计算说明	5
6：分子动力学计算说明	5
7：机器学习、深度学习与数据分析	5
8：有限元模拟	5
三：计算服务说明	7
1：模型的构建	7
2：数据提供说明	7
3：论文撰写、审稿意见说明	7
4：关于自费、算例、教程的说明	7
5：关于探索性计算的说明	8

一：概况

“碘到为酯”是 bilibili 平台理论计算化学领域知名 UP 主，拥有 **>5.6w 关注、>180w** 播放量，长期接受 **代算、计算咨询、教程类** 委托：

- 1：可以委托一整套研究内容 or 计算个别数据。
- 2：可以开具 **正规发票、签订正式合同、可提供服务清单** 等等，发票内容可以为“服务费”、“技术服务费”、“测试费”等，协商而定。
- 3：提供所有 **源文件**，必要时提供数据的 **视频讲解** 以及相关 **化学知识** 的补充。
- 4：对于 >1000 元的计算任务，在计算任务开始前需缴纳 **25% 的订金**。
- 5：计算保证 **理论方法、软件使用都是合理可靠、符合业内标准** 的，也可以用户指定，但无法保证计算结果一定符合实验。
- 6：只承接 **有信心很好完成** 的任务，并高效完成。若研究中途由于我们的原因不得不终止承接的任务，会将详情向委托方交代清楚，如果已付订金也将全数退回。

二：计算费用参考

注：

•默认情况下，会根据委托方的体系特征选择最佳的计算级别。委托方不需要过多计算化学方面的知识，只需描述清楚目的是什么、想要什么样的结果就够了。

1：结构的计算与价格系数

所有的费用都以**价格系数**为基准，所谓的“30%”是指：价格系数*30%。

相似体系计算**多个结构打折**，计算的结构越多收费越低。

理论方法	原子数-价格系数						
	0-40	40-60	60-80	80-100	100-120	120-150	150+
DFT	<u>200</u>	<u>250</u>	<u>300</u>	<u>360</u>	<u>480</u>	<u>600</u>	<u>≥600</u>
半经验	DFT 价格的 1/3						
MP2/双杂化	DFT 价格的 1.5-2 倍，最多支持 ~ 150 个原子						

注：

①默认方法：B3LYP-D3(BJ)/def2-SVP 或 6-31G**。也可以用户指定。

②原子数：是针对常见的 **CHON 有机体系**而言的，如果含有较多**重原子**，**折合原子数↑**

③开壳层计算，费用增加 20%，与其他费用乘算

④镧系、锕系元素：视难度而定，加收 30%-100%

⑤构象搜索：仅计算全局最优构象加收 100%，此外每计算一个构象，加收 50%。

⑥溶剂模型：推荐使用 PCM 或 SMD 溶剂模型，加收 10-20%

计算化学的各类任务、计算资源：[BV1pFd6YhECa](#)

量子化学中的各类理论方法选择：[BV1tC4y177gr](#)

关于开壳层、自旋多重度：[BV14z4y1K7bM](#)

关于构象：[BV1Z65NzhEzD](#)

2：能量、性质、光谱的计算

①结构优化级别下的能量、偶极矩、分子图、键长键角二面角：免费

②高精度能量计算：

→较好的杂化泛函：如 M062X or wB97M-V/def2-TZVP：30%

→高精度双杂化泛函：如 wB97M(2)/def2-QZVPP：100%

→后 HF 级别、多参考方法等：详谈

③热力学量计算、IR 光谱计算：30%-50%

④NMR 计算：+50%

⑤XRD、XPS、STM 模拟等：+20%

3: 势能面与过渡态搜索

- ①过渡态搜索：100%-500%，视复杂度而定
- ②产生 IRC：50%
- ③制作电子结构随 IRC 的动图：IRC 点数×20%
- ④势能面扫描，产生反应路径 CI-NEB：100%
- ⑤基于过渡态理论 TST 计算化学反应速率：20%
- ⑥从头算分子动力学：视跑的时间长短而定

注：过渡态搜索复杂度远大于结构优化，必要时需要委托方提供可能机理或相关文献支持。

若无可参考的反应路径，也可以由我们通过化学经验和理论计算来拟定，并交给双方确认，价格详谈。

4: 激发态计算

默认是基于 TDDFT，也可以基于多参考方法

- ①UV-Vis 谱、激发能、ECD：+50%
- ②荧光、磷光的计算：+100%（需激发态结构优化）
- ③振动分辨光谱 +200%（激发态结构优化+振动分析）
- ④激发态动力学，如：重组能分解、Huang-Rhys 因子、系间窜越速率、内转换速率 +200%
- ⑤旋轨耦合矩阵元 SOCME +30%
- ⑥激发态电子结构分析，如 NTO，电子空穴、CT、LE 态等：详谈
- ⑦势能面交叉相关：详谈

5: 波函数分析

内容包含但不限于如下方面：

- ①分子轨道分析：
 - 轨道图、HOMO-LUMO gap、能级：免费
 - 轨道成分分析、轨道定域化：20%
 - NBO 分析、计算 NPA、NRT 等：30%
- ②电荷转移分析
 - 原子电荷：+20%，RESP、AIM 电荷+50%
 - 差分电荷密度：+60%
 - 电荷分解分析：+50%
 - 偶极矩、多极矩等：结构优化级别下，免费；精确计算+50%
- ③化学键分析与态密度
 - 计算键长键角：免费
 - 计算各类键级：20%
 - 搜索并考察键临界点（BCP）：30%
 - 计算态密度、COHP、COOP：30%
 - 产生 ELF（电子定域化函数）：30%
- ④弱相互作用分析：
 - RGD、IRI、IGMH 等值面图绘制：50%
 - 能量分解分析：50%
 - 范德华势分析：30%
 - 分子表面分析（如静电势、福井函数、局部电离能等等）：50%
 - 计算结合能 or 键解离能：50%

⑤反应活性分析:

→前线轨道理论: 免费

→计算并绘制福井函数、双描述符: 50%

→概念密度泛函理论分析(电离能、电子亲合能、化学势、软度硬度等): 50%

⑥固体物理、半导体物理有关概念

→功函数、费米能级、能带结构、电子有效质量等等: 详谈

相关视频:

分子轨道理论: BV1jN4y1o7gH

原子电荷: BV18a5szBEV2

轨道成分、键级: BV1CH4y1K7ze

弱相互作用: BV1u94y1Y7tv

激发态: BV11m411178t

能带理论: BV1UA4m1A7YV

化学键相关分析: BV1k3E9zJEzv

分子极性分析: BV1cKKtzvEdf

5: 第一性原理计算说明

第一性原理计算适用 1-4 中的价格和计算项目，对于一些特定内容，做如下说明：

- ①第一性原理计算结合 CP2K 软件，最多可以算到 1000 原子。
- ②使用杂化泛函进行计算，耗时和价格会显著增加。
- ③默认会通过给定文献、或程序手册中的经验方式确定 k 点、截断能，若需要进行 k 点，截断能测试，加收 50%（多个结构若元素组成类似，仅加收一次）。

6: 分子动力学计算说明

主要通过 Gromacs 结合主流力场做分子动力学模拟，默认体系溶剂为水

价格 = (200+原子数/500)*(2+模拟的纳秒数/100)

原子数	5w	10w	15w	20w
价格/100ns	900	1200	1500	1800
价格/200ns	1200	1600	2000	2400
价格/300ns	1500	2000	2500	3000

①构建拓扑文件：

如果没有分子现成的拓扑文件（如自己合成的分子、非标准残基的酶）等等，需要通过量子化学计算构建相应的参数文件，需购买 1-4 中：结构优化+RESP 电荷计算

②轨迹分析：

- 播放轨迹、某几帧绘图：免费
- 少数几个键长、键角、二面角随时间的变化、波动：免费
- 盒子尺寸、密度、温度、压强等：免费
- 统计氢键、特定残基间的最近距离、接触数、密度分布、电荷分布等等 每一项+10%
- 特定组之间相互作用能随时间的变化：+50%
- 计算结合自由能 GMX-MMPBSA：+50%
- 其他杂项：详谈

③特殊动力学：如拉伸、剪切、加外场、增强采样等等：详谈

④分子对接：500-1000 做一组对接，视体系大小、对接范围、算法精度而定

7: 机器学习、深度学习与数据分析

训练主流机器学习模型或深度神经网络，进行分类、回归、统计、数据分析、可解释性任务，具体内容请直接与我们联系。

8: 有限元模拟

可根据客户需求定制有限元仿真方案，或按照客户提供的文献方法开展仿真研究。承接文章复现、课题研究、仿真教学等多种计算任务。具体可承接的研究内容如下：

①传热与流体力学仿真

可研究内容：单相流、两相流、马兰戈尼流、毛细力、浮力等流体力学问题；固液气相变、热管理、温度场分析等传热问题；以及传热-流体耦合的非等温流动等问题。

可输出数据：温度分布、流体速度分布、各相分布、材料相分布、凝固/熔化/汽化速率等。

②微纳光学仿真

可研究内容：连续域束缚态（BIC）、光子晶体、超表面、衍射分析、多极展开、晶格共振、全息超表面、光学手性、超透镜、偏振转换等光学机制。

可输出数据：散射/透射/反射光谱、近场电磁场分布、远场辐射特性、动量空间成像等。

③结构力学仿真

可研究内容：材料屈服与弹性变形、振动模态分析、热应力与晶格失配应力、压电效应、接触-摩擦-剥离行为、复合材料力学等。

可输出数据：应力应变分布、振动频率与模态、接触压力、变形场等。

④电池与半导体器件仿真

可研究内容：太阳能电池、钙钛矿电池等半导体器件的电学与光电性能。

可输出数据：J-V 曲线、P-V 曲线、载流子浓度分布、电势与电场分布、体相与界面复合率等。

⑤计算电磁学仿真

可研究内容：电路元件（电容、电感）、线圈、磁铁、发电机、电动机等电磁设备。

可输出数据：电势与磁矢势分布、感生电动势与电流、电磁-热耦合场、洛伦兹力、涡流场等。

三：计算服务说明

1：模型的构建

①模型选择的优先级为：委托方提供的>=业内广为接受或有文献支持的>自行拟定的

②在开展计算前，会将模型和拟计算内容展示给委托方，由委托方确认通过此模型计算。我们的计算保证理论方法、软件使用都是合理可靠、符合业内标准的，但无法保证100%符合实验或预期。若计算结果不符合，可以通过合理的调试来更接近实验结果（例如搜索构象、更换计算级别和模型等等）。

2：数据提供说明

①**数据交付**：在交付订金后即开始计算，在计算结束后会将少量数据提供给委托方，委托方确认并支付剩余费用后，我们会在3个工作日内将数据以网盘的形式交付给委托方，数据包括但不限于：

→对数据的文字或视频说明、以txt或ppt格式，必要时以视频的方式

→所有源文件

→委托方需要的具体数值：如结合能、激发能、GAP、台阶图中的能量、光谱txt文件

②**绘图**：对于等值面图（如轨道图）、分子结构渲染图、晶体结构图等这类“具有理论化学工作经验才能画好的图”，我们默认会提供艺术级的主视图、侧视图以满足论文需求；对于能级分布、光谱、机理、台阶图等这类“需要结合论文排版、且根据原始数据明显用PPT或者PS就能自己画好的图”，我们只提供数据获取方法和画图方法，不提供成品图。

3：论文撰写、审稿意见说明

①不负责撰写正文部分，对正文部分写作仅提供建议和指导

②默认仅提供当前计算级别的简单中文描述，若要撰写SI部分的Computational Details，需额外收费，我们不参与SI材料的排版，委托方需自行将相应内容插入到SI中。

→简单DFT计算SI的撰写：300；简单分子动力学模拟：300

→通过DFT构建拓扑文件、随后跑分子动力学：500

→DFT计算基础上做了一系列激发态、波函数分析等等：500

• 关于审稿意见

→对于由我们提供的模型、计算方法、分析方法、数据、撰写内容，我们会帮助回复审稿意见，并对其中出现的错误负责。

→由委托方给定模型、计算方法、分析方法时，我们只负责提供计算结果（相当于此时我们就是台测试仪器）。

→对于委托方无视我方建议，拿着我们提供的数据任意发挥、断章取义，在正文中不合理地分析、撰写，导致出现错误时，我们不负责。

4：关于自费、算例、教程的说明

有不少观众咨询自费代算、自费计算咨询、自费教程，目前也接受此类委托，说明如下：

①自费，以学习为目的的，可以自行选择合适的体系（比如自己领域内的文章、自己的体系等等），并委托代算，在提供计算结果的同时，我们会提供计算细节、计算思路以及详细的输入输出文件、乃至视频教程（如果用图文无法准确描述的话），相当于对特定案例进行针对性教学，并提供针对性答疑。

此时按代算原价收费，若需提供视频教程则视复杂度而定。教程仅展示完整的计算过程，并

对输入输出文件和参数进行解释，而不深入讲解原理。例如自己算 5 步反应，可以只买 1-2 步的计算内容，剩下的自己当作练习，并结合 b 站系列教程，自己也能差不多算完，这样可以节省很多。

②学生仅自费代算，包含常规答疑，**打 75 折**

5: 关于探索性计算的说明

实际计算实践中，在很多情况下，计算内容并不完全明确、或对计算结果拿不准，例如：

- ①反应机理不知道具体路径是什么样，只知道反应物和产物
- ②需要算通一条能垒 $<25\text{kcal}$ 的机理，有多条可能的反应路径待选择，但拿不准哪一条是最好的
- ③有很多个底物，要算相同的内容，但不知道算这个东西有没有意义，全部都算又很贵。（比如多个同系物都要算 ESP 图、多个芳香化合物都要算 AICD 图等等）
- ④有很多种建模方式（比如簇模型），不知道怎样建模最合理最经济
- ⑤我估摸着 A、B 会结合，但不确定结合方式符不符合我的预期，能否预计算一下

.....

对于以上情况，显然直接进行全套计算是不合理或预算远远高出预期的，此时：

- ①支持在半经验级别下先预先筛选，然后选定符合条件的路径和内容进行计算，价格仅为 1/3，后续若进行 DFT 计算，只补收后续的 2/3。
- ②对于多套平行计算，支持“先算一步看看效果”，此时单步收费略微上调，若后续计算全部内容，则总收费不变。

碘到为酯
更新于 2025.12.1