

海南水木新材料 计算材料服务手册

MLIP / DFT / MD 计算服务 —— 为科研与工业研发加速

海南水木新材料有限公司

多篇 SCI 论文发表 | DPA-4 / DPA-3.2 原生 | MLIP + DFT 双证据

联系: xinchen50@126.com

关于我们

海南水木新材料是一家以机器学习势能（MLIP）与第一性原理计算为核心的计算材料服务团队。我们为高校、科研院所与企业研发提供缓蚀剂、催化、电池、涂层等方向的高通量筛选、分子动力学模拟与论文级计算支持。每单交付：原始数据、出版级图表与完整方法报告，并默认进行 DFT 交叉验证。

核心服务

1. MLIP 训练与微调 — ¥2000+ / 项目

基于 DPA-4 / DPA-3.2 为目标体系（Fe、Cu、合金、涂层）训练/微调机器学习势能。交付：模型文件、训练报告、力/能量误差验证、MD 稳定性测试。您的私有数据集全程保密。

2. 高通量吸附能筛选 — ¥1000-2500 / 批

分子在金属表面（fcc/bcc 多晶面）吸附/结合能筛选，单批 50-300 体系，DPA/CHGNet 快速计算 + 排序 + 文献锚定。适合催化与缓蚀剂筛选。

3. 分子动力学模拟 — ¥1200-2000 / 体系

300-400K NVT/NVE 模拟：吸附稳定性、扩散、界面行为。交付轨迹统计、能量分析、稳定性排序与图表。

4. DFT 验证计算（CP2K） — ¥800-1500 / 结构

密度泛函单点能、几何优化、吸附能验证——交叉核对 MLIP 预测，双证据标准。

5. 论文出版级包 — ¥3500-7000 / 项目

端到端支持：计算 + 图表 + 方法学文本，直达 SCI 投稿标准。适合需要计算支撑的科研团队。

6. 技术咨询 — ¥500 / 小时

MLIP 工作流、数据集准备、DPA 部署、模拟策略评审一对一指导。

合作流程

第 1 步 · 需求确认

发送体系信息（结构文件、目标性质、截止时间），24 小时内回复固定报价与排期。

第 2 步 · 开始计算

50% 定金启动。GPU 集群计算，输入校验与质检检查点。

第 3 步 · 质检交付

三道关质检（能量量级 / 元素组成 / 需求匹配），交付数据+图表+报告。

第 4 步 · 修订结清

两轮免费修订，交付结清尾款。NDA 与知识产权保护可定制。

质量保证

- 1) 三道质检：能量量级、元素组成一致性、需求匹配——每单必过。
- 2) 双证据标准：MLIP 高通量初筛 + CP2K DFT 交叉验证。
- 3) 出版级输出：丰富 SCI 论文发表经验的团队，结果默认达期刊标准。
- 4) 数据安全：默认 NDA、专属计算实例、数据不跨客户复用。

价格一览

MLIP 训练/微调	¥2,000 - 4,000
吸附能筛选（50-300 体系）	¥1,000 - 2,500
分子动力学（每体系）	¥1,200 - 2,000
DFT 验证（每结构）	¥800 - 1,500
论文出版包	¥3,500 - 7,000
技术咨询	¥500 / 小时
加急交付	+30%

常见问题

Q: 交付周期?

A: 通常 3-7 个工作日; 加急 +30% 可 1-2 天。

Q: 需要我提供什么?

A: 结构文件 (CIF/XYZ/POSCAR)、目标表面/晶面、需要的性质。没有结构我们可代建。

Q: 如何付款?

A: 银行转账或微信/支付宝; 50% 定金启动, 50% 交付结清。可开发票。

Q: 不满意怎么办?

A: 两轮免费修订; 计算不收敛免费重跑或退还对应费用。

Q: 数据保密?

A: 默认 NDA, 专属实例, 数据不跨项目复用。

Q: 哪些不做?

A: 我们只卖方法/工具/数据/算力, 不提供配方设计或具体产品配方优化。

Q: 学术合作?

A: 欢迎共同署名与合作协议, 尤其"计算+实验"团队。

24 小时内获取报价

xinchen50@126.com | 海南水木新材料有限公司 · 海南省海口市