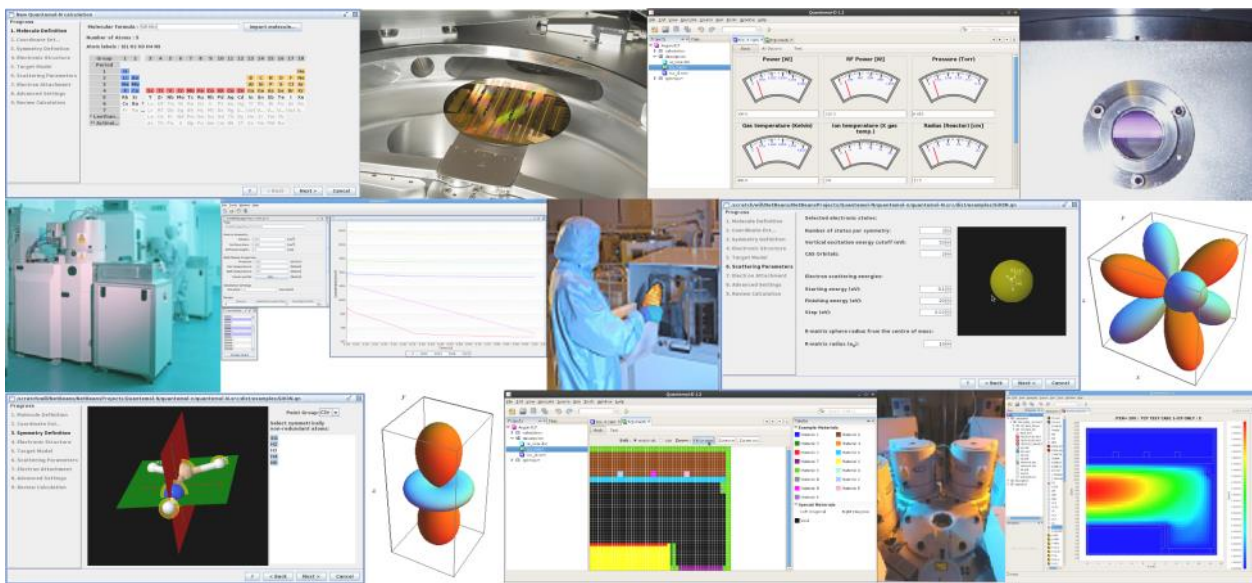


# Quantemol



## Quantemol-N 2014 手册

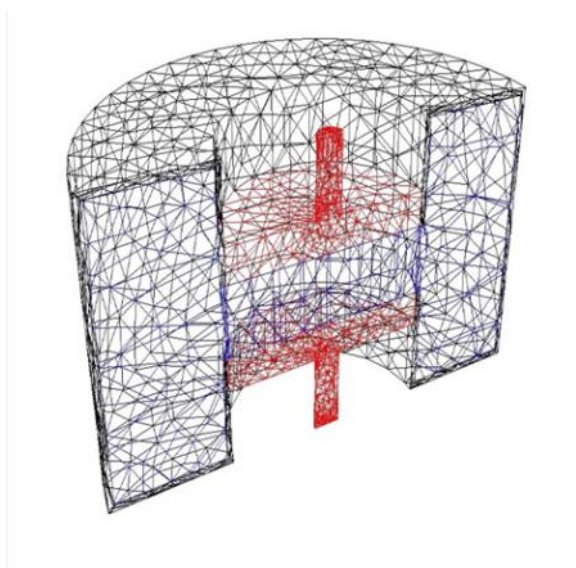
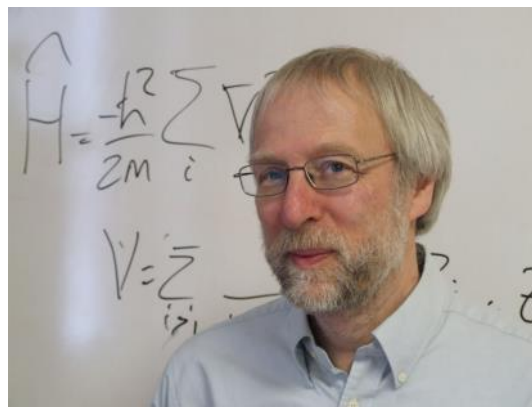
## 公司介绍

Quantemol位于英国伦敦大学学院 (University College London, 右图), 于2004年由 [Jonathan Tennyson FRS教授](#) (右下图) 和 [Daniel Brown博士](#) 创立。公司致力于开发能够解决高度精密复杂的科学模拟问题的软件工具。Quantemol-N能够快速应用模拟电子和多原子分子相互作用的分子R-matrix程序, 从而在整体上减少创建模拟的时间。在Quantemol-VT中, 由密歇根大学 (University of Michigan) 的Mark Kushner教授建立的世界领先的等离子体模拟程序将会带来前所未有的用户体验。除此之外, Quantemol优秀的科研团队还可以提供相关咨询服务, 这些咨询项目将由世界各领域顶尖科学家共同完成。



## 公司宗旨

“让我们工业界和科研界的客户在模拟复杂的问题时能够更有效、更可靠、更准确、性价比更高, 从而加快科技创新。”



## 联系我们

Quantemol Ltd  
Physics and Astronomy Department  
University College London  
London,

WC1E 6BT, UK

+44 207 679 34 76

[info@quantemol.com](mailto:info@quantemol.com)



## 背景

低能电子和分子的碰撞过程在环境和现代科技中的诸多方面发挥着重要影响，包括：

- 触发等离子刻蚀
- 控制激光过程
- 控制内燃机点火
- 决定聚变等离子体的边缘效应
- 造成生物组织的辐射损伤
- 决定地球电离层活动

对于这些碰撞过程的直接测量是昂贵并且难以施行的，对于碰撞过程的理论预估则需要利用量子力学进行极其复杂的计算过程。

Quantemol-N提供了一个可以操控分子R-matrix程序的专业控制界面，使得该程序本身复杂的使用过程变得便捷。

## Quantemol-N产品

Quantemol-N包括标准版本(standard edition, SE)和企业版本(enterprise edition, EE)。企业版本涵盖标准版本的所有特性，并增加了批处理特性和一个SCATCI的并行版本(在多核计算仪器上会大幅度缩短运算时间)。除此之外它还提供了更多的分子范例(现行版本大约40个)，从而能让用户直接上手使用。

## Quantemol-N的适用范围

- 闭壳层分子
- 开壳层分子，自由基
- 中性和正电性物质
- 多原子(经测试可达17个)分子

## Quantemol-N (4.3版本) 功能

计算多种电子-分子碰撞过程的可观察量，包括：

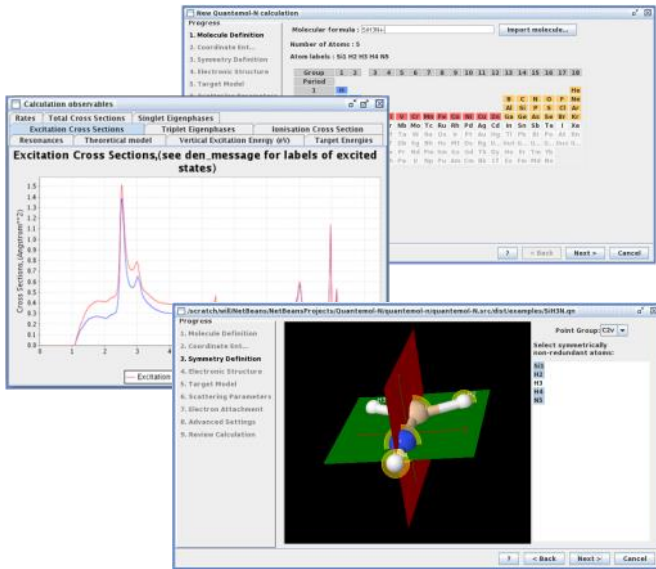
- 弹性碰撞截面
- 电子激发截面(可引申至高能量级)\*\*
- 激发能级之间的超弹性截面
- 电子碰撞解离反应
- 电离截面
- 散射反应率
- 共振参数
- 估算游离电子吸附\*\*
- 微分截面
- 动量转移截面
- 电子轰击电离(所有能量级)\*\*
- 分子截面角分布
- 转动激发截面
- **光致电离截面(新)**

\*\* 标准R-matrix程序所不包含的特性

## Quantemol-N的核心优势

- 基于世界领先的分子R-matrix程序
- 容易使用的图形界面：建立计算只需7步
- 运算结果输出形式灵活且人性化
- 台式电脑和笔记本电脑均可运行
- 新配备Q-N Express特性  
从而更快捷地创建有关已知分子的计算\*

\*分子结构信息来自开放数据库NIST，自动完成对称性设置

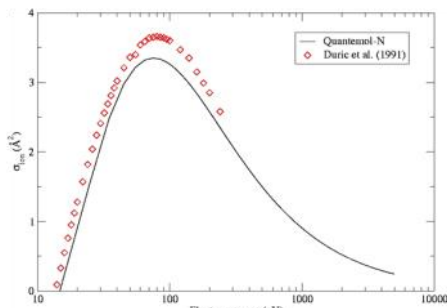


Quantemol-N 提供易于操作的图形界面  
使模拟的创建过程更加简单

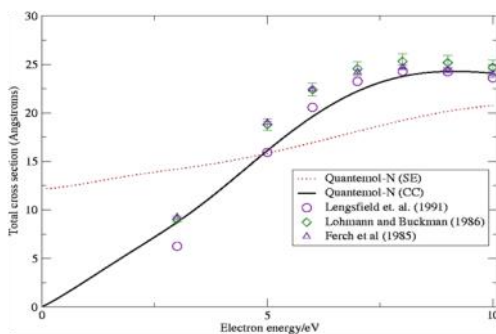
## 近期论文引用

1. Electron impact total cross section for acetylene over an extensive range of impact energies (1 eV-5000 eV)  
M.Vinodkumar, A. Barot, and B. Antony,  
Journal of Chemical Physics (2012)
2. Calculation of electron-impact rotationally elastic total cross sections for NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>S, and PH<sub>3</sub> over the energy range from 0.01 eV to 2 keV. Limbachiya C, Vinodkumar M, Mason N, Physical review A (2011)
3. Electron ionization of exotic molecular targets CN, C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>, HCN, HNC and BF- Theoretical cross sections. Pandya, Siddharth H.; Shelat, Foram A.; Joshipura, K. N.; et al. International Journal of Mass Spectrometry (2012)

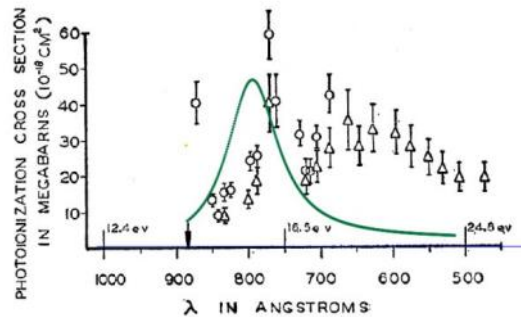
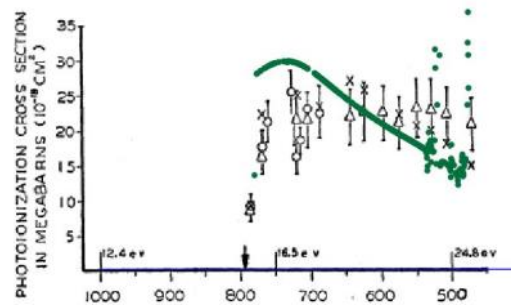
## 对比实验数据



CH<sub>4</sub>的BEB电离截面。图为Quantemol-N数据与实验数据(Duric et. al., 红色菱形)的对比。



CH<sub>4</sub>的总截面。图为Quantemol-N数据(黑色线和红色线)对比理论计算(Lengsfeld et. al., 圆形)和实验数据(Lohmann & Buckham, 菱形, Ferch et. al., 三角形)

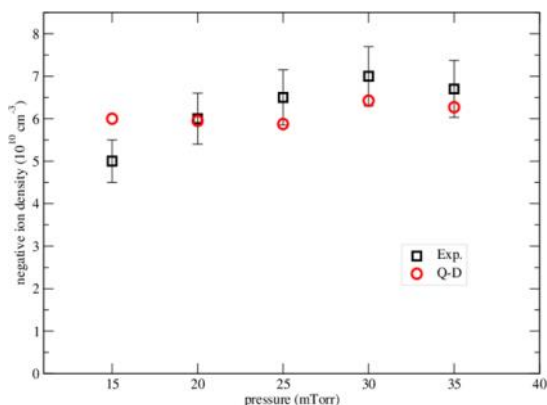


N<sub>2</sub> (上图) and CO<sub>2</sub>(下图)的光致电离截面。图为Quantemol-N 计算与实验数据(N. Wainpan et. al., Phys Review v. 99, p. 542)的对比。

# 咨询服务

Quantemol 公司在提供先进的建模软件的同时还将推出独一无二的咨询服务。我们专业娴熟的工程师会提供针对具体客户需求的全面深度的数据分析，来搭配我们的软件套装。咨询范围可满足从小型计算到项目综合发展等不同程度的需求。典型的咨询项目例如：

- 特定的电子-分子碰撞截面计算
- 工业等离子体模拟工具
- 等离子体过程的参数优化
- 等离子体化学
- 等离子体刻蚀和沉积计算
- 一般多物理场耦合问题  
(计算流体动力学等)



Quantemol 已经成功承担了多个大型咨询项目。公司的服务特色之一是我们不拘泥于特定的标准需求，而是能够在时限内通过文献查询和各种计算机方法来达到预定结果。我们一直致力于给客户带来真正的价值，并且会根据客户的需求按优先顺序处理研究问题。在任务完成后我们还会提供一份正式的结果报告（包含原始数据，图形以及视频等），以便于客户及时使用和展示。我们会对结果严格保密并且尊重和保护知识产权。

