

让原子模拟 像对话一样简单

LASPAI 人工智能计算物质研发平台

新一代原子尺度智能化模拟平台·AI原生·MCP开放

www.laspai.com

操作简单
Easy to Use

周期表全元素全覆盖
Full Periodic Table Coverage

千倍级加速
Up to 1,000× Faster

动力学模拟任务
Molecular Dynamics Simulation

多领域场景覆盖
Multi-Domain Applications

AI 原生架构 驱动物质计算

LASPAI 融合第一性原理精度与机器学习加速技术,实现材料结构预测、热力学演化、界面作用分析及化学反应机理模拟的一体化计算。支持云端与本地私有化部署,兼容主流结构文件格式,可衔接结构建模、实验验证、机理分析、论文出图及项目数据交付等科研流程。

FOUR CORE ALGORITHMS 四大底层核心算法

01 通用全局势函数

基于千万级高精度全局量化数据集构建,周期表全元素覆盖,兼顾复杂体系高精度与快速模拟,为大体系仿真提供高性能计算底座。



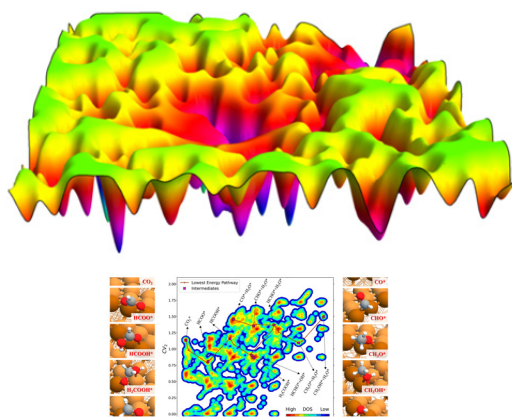
训练数据合计 **7,268,130**

数据集 **DFT (GGA-PBE);含O, F的La~Lu PBE+U;**

89种元素

02 SSW 全局势能面遍历优化算法

通过可控原子扰动实现大范围势能面随机行走,自动搜索全局最低能量构型,有效摆脱高能极小值陷阱。



03 多系统分子动力学(MD)引擎

完整支持 NVT、NPT、NVE 三大统计系综,具备范德华色散修正与长程相互作用校正能力,可模拟材料在不同温度、压力下的动态结构演化,为热力学性质分析提供可靠构型。

04 智能化过渡态搜索与 IRC 反应路径算法

支持单结构键约束与 IS / FS 两端点插值双模式建模,自动完成过渡态优化、虚频校验与 IRC 全程路径回溯,精准判定反应能垒与原子迁移规律,实现机理的定量与可视化解析。

MODULAR WORKFLOW 平台模块化 workflow

01 自动化建模

02 全局结构搜索

03 多系统动力学

04 热力学分析

05 过渡态机理

06 界面吸附计算

07 3D可视化

08 标准化报告导出

从原子模拟到反应预测 完整科研能力链

固液界面自动建模

吸附能精准计算

反应路径全局搜

覆盖固态、液态与界面三类典型凝聚相体系的自动化建模与原子级模拟，为材料热力学、结构稳定性与界面作用机理研究提供完整仿真基础。

固态/液态/界面体系自动生成和原子模拟

固态体系自动生成:基于周期性晶体结构自动构建超胞模型，支持晶面切割、表面重构、缺陷掺杂等多种固态建模方式，一键生成弛豫后的稳定固态结构。

液态体系自动生成:通过多分子随机填充与长时间 NPT 动力学弛豫，自发达到液态无序平衡状态，复现分子自由扩散、无序排布、动态重组等液态行为。

界面体系自动生成:支持固液、固气、液液等多相界面自动堆叠建模，可自定义溶剂层厚度、表面晶面与真空层参数，快速构建多相界面模拟体系。

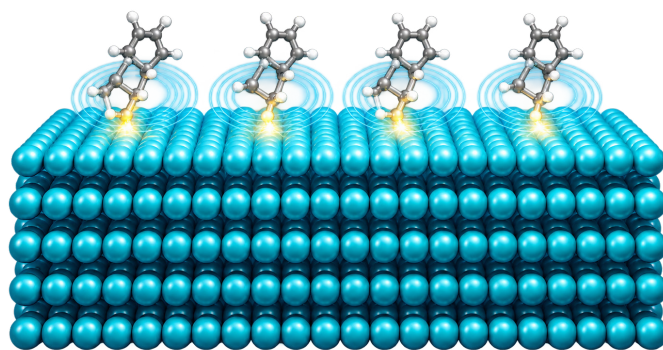
全流程原子模拟能力:从体系自动构建、结构优化到分子动力学模拟全流程自动化，支持 NVT/NPT 系综、晶格弛豫、扩散分析等多类计算，为凝聚相材料研究提供标准化原子级仿真方案。

表面吸附能计算与多分子共吸附模拟

界面吸附是多相材料、催化体系最核心的研究场景。LASPAI 具备从单分子精准吸附能计算到多分子共吸附高阶模拟的完整能力链。

平台内置标准吸附能计算范式，通过 SSW 全局扫描表面顶位、桥位、空位等全部潜在吸附位点，筛选热力学最优吸附构型，同时输出吸附键长、界面电荷转移、电子结构变化等微观信息。

在单分子吸附基础上，进一步支持复杂多组分界面体系仿真，通过全局结构搜索获得多分子稳定共存构型，定量区分位点抢占、空间位阻、界面电子调制效应带来的吸附抑制行为。



化学反应智能探索和预测

基于原子尺度模拟与 AI 势能面，LASPAI 支持从有机分子反应到复杂表界面反应的机理研究与全局反应路径自动搜索，为催化、合成与材料设计提供理论指导。

有机、表界面反应机理:支持有机分子反应与多相表界面反应的机理模拟，自动定位过渡态、计算反应能垒与热力学参数，输出完整反应路径与电子结构演变信息。

全局反应搜索:基于全局势能面自动搜索算法，系统探索复杂体系下所有可能的反应通道与产物分布，发现未知反应路径，为催化剂设计与反应机理揭示提供全局视角。

从计算到成果交付 全流程闭环

01 专业级 3D 可视化与动态渲染

前端LaspView 具备科研级高清渲染能力,支持原子球面模型、晶格线框、氢键/弱相互作用虚线、过渡态半断键高亮,可自由调节视角、景深与渲染精度。

支持一键输出高清动力学轨迹、反应路径动画与结构演化视频,画面层级清晰,可直接用于论文配图、课题汇报与学术会议宣讲。

02 标准化科研数据交付

平台输出成套、可直接发表的完整数据包;所有参数规范、可溯源、可复现,满足学术发表与项目结题数据要求。



平衡结构文件

优化收敛·EQ结构



能量收敛数据

能量·步数曲线



动力学轨迹

MD 帧序列文件



电子结构图谱

能带 / 态密度



机理演化动画

反应路径视频



定量对比数据表

吸附能 / 能量对比



标准化计算说明文档

参数·方法·复现



可溯源·可复现·可直接发表

成套数据包·标准化交付

03 技术服务与落地支持

- 公有云轻量化使用与本地私有化集群部署
- 建模、结构优化、固液模拟、界面吸附及反应机理等定制计算
- 技术培训、课题协助与商业技术支持
- 数据闭环可控,适配个人、团队与企业级算力场景

04 应用领域

新材料

新能源

生物医药

半导体

化工

PRODUCT MATRIX 产品矩阵

灵活产品形态 适配不同科研场景

01 LASPAI WEB | 在线 SaaS 服务

订阅制

• 浏览器云端访问, 开通即用

个人研究者
小型研发团队
教育机构

02 LASPAI Server | 一体机服务器

硬件销售 + 软件授权

• 整机部署 + 现场调试 + 年度维保

大中型企业研发部门
高校实验室
科研院所

03 LASPAI Workstation | 科研工作站

硬件销售 + 模块化软件授权

• 整机交付, 软件模块自主激活

个人研究者
小型研发团队
桌面级计算场景

04 LASPAI 私有化部署

软件授权 + 部署实施 + 年度维保

• 在客户现有算力硬件上部署软件系统 + 现场调试与年度维保

已有本地算力设备的
企业科研院所及政府机构

05 LASP | 软件及势函数

软件授权 + 商业技术支持

• 软件授权分发 + 技术支持与培训

计算化学研究者
材料科学团队
高校与科研机构

06 HPC算力服务 | 高性能计算服务

按算力 / 时长计费 (按需弹性)

• 云端算力租赁, 弹性扩缩容

有大规模并行计算需求的
科研团队、企业研发部门

07 LASPAI 数据计算服务

按项目 / 按计算量计费

• 计算数据交付 + 分析报告

科研机构
企业研发部门

08 LASPAI Agent MCP 服务

接口订阅 / 按调用量计费

• MCP 接口接入 + 技术支持

第三方开发者、AI 应用
智能体平台
企业



— ABOUT FUAN INTELLIGENCE 企业简介

让材料研发 算得准, 更算得快

上海复鞍智能科技有限公司由复旦大学化学系刘智攀教授团队孵化, 是物质科学智能仿真领域的创新型企业。

公司融合计算化学、材料科学与人工智能能力, 自主研发LASP算法引擎及LASPAI人工智能物质研发平台, 覆盖结构生成、全局搜索、动力学模拟、反应机理分析与科研数据交付。

用户支持: support@laspai.com

商务合作: bd@laspai.com

公司地址: 上海市静安区江场三路228号