

思跃智算-不止计算

计算化学 · 科研图例

215个主卡 · 6套配色

分子DFT

结构与构象	003
反应路径与能垒	005
分子振动与红外光谱	006
热力学与溶剂效应	007
电子结构与分子性质	011
化学键与成键分析	022
弱相互作用	024
激发态与光物理	026

周期性计算

晶体、界面、空腔结构	046
缺陷与掺杂	049
吸附构型与吸附能	050
电荷转移与成键分析	053
表面反应与催化	058
离子迁移与能垒	061
能带与态密度	062
晶体振动与声子	066
激发态分析与光催化	—

碘到为酯

b站 粉丝 6.6w · 获赞 8.4w · 播放 220w+

点击栏目或 PDF 书签定位图例

分子动力学

体系结构与构象	068
结构稳定性	073
溶剂化与配位结构	076
分子间相互作用与氢键	079
结合自由能	088
扩散与输运性质	089
自由能与构象分布	091
自组装与聚集	093
界面、孔道与空间分布	096
主成分分析与集体运动	—
其他自定义图	—

表达方式与配色

按画法浏览

科学主题和表达方式共用同一图例编号。

曲线与时间序列	004
柱状图与分类比较	007
散点图与回归	016
气泡图与多变量关系	117
分布与统计比较	018
热图与矩阵	010
等高线与三维曲面	085

台阶图与能级图	005
光谱与色散图	006
网络与流向图	128
多指标与组成图	031
结构与空间场	003
组合图与自定义表达	035

多组对比配色	098
连续渐变配色	—
双向渐变配色	099

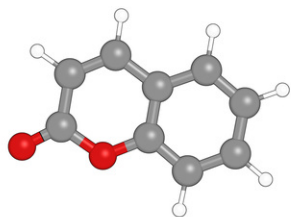
同一科学量可采用多种表达方式；色彩用于区分体系、突出趋势与组织比较。

图055 独立计算

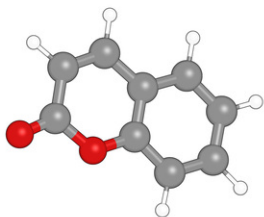
分子球棍结构与几何特征

分子结构 · 几何构型

Face view



Oblique view



Coumarin | C=O bond: 1.201 Å

本卡含 6 个展示版本；原编号：图055、图013、图062、图152、图153、图154。

从展开面与斜视方向展示同一分子，并标注代表性键长。两种视角相互补充，便于辨认**官能团连接与局部几何**；用于构型说明或与电子结构分析并列时，可将关注的键长、键角和二面角作为辅助标注。

Coumarin · independently optimized structure

画法参考：分子结构、构象和几何位置对照

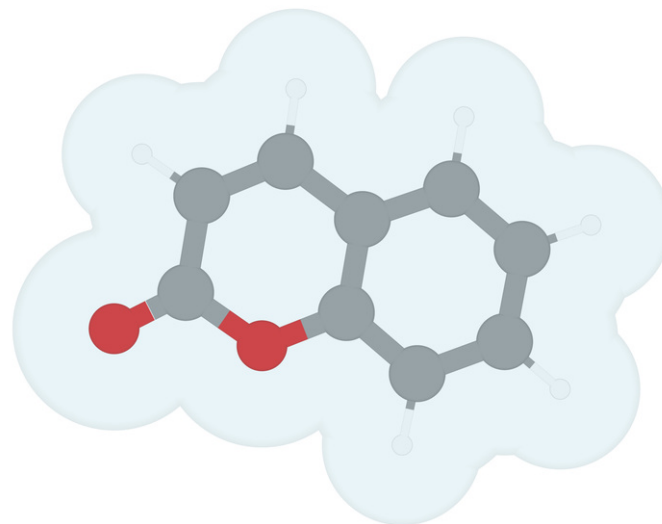
Nat. Commun. 2023, 14, 5061. Fig. 7a,b,d

DOI: [10.1038/s41467-023-40831-8](https://doi.org/10.1038/s41467-023-40831-8)

图063 独立计算

范德华外壳与分子骨架

分子结构 · 几何构型



将半透明范德华外壳与内部球棍骨架叠合，同时展示**分子占据空间与连接关系**。适合比较分子形状、局部遮挡和空间可达性，帮助理解取代基尺寸与结构匹配的几何基础。

Coumarin · independently optimized structure

画法参考：空间填充与电子密度表面叠合分子骨架

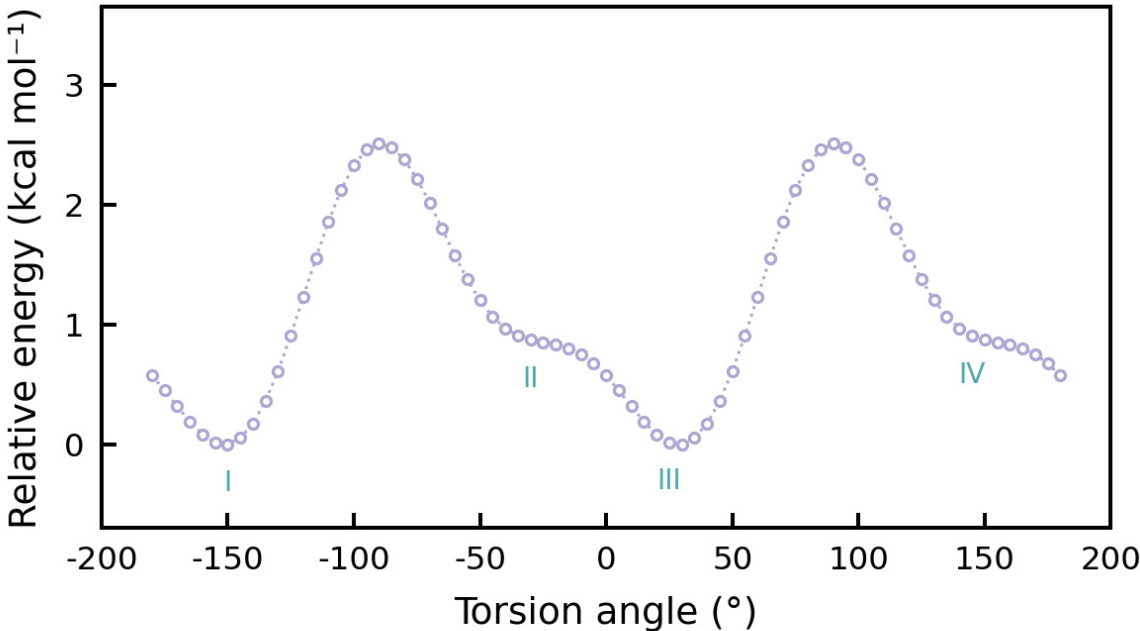
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 6378-6383. Fig. 3C

DOI: [10.1021/jacs.5c00165](https://doi.org/10.1021/jacs.5c00165)

图014 示例数据

扭转角与构象能量

构象扫描 · 扭转角 · 相对能量



Illustrative data

沿分子内关键二面角展示相对能量变化，辨认**稳定构象、旋转能垒与构象转换区间**。曲线与离散计算点相结合，可比较取代基、分子内相互作用或环境对柔性的影响，并与代表结构、振动频率和光物理性质对应，说明构象变化产生的结构与能量响应。

独立示例数据

应用参考：扭转势能扫描与代表构象

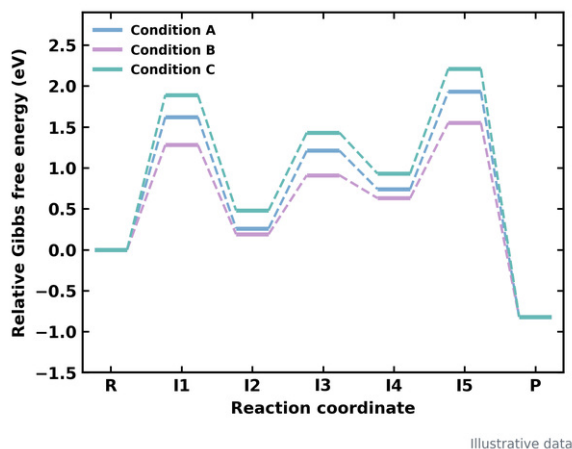
Nat. Commun. 2023, 14, 5061. Fig. 7c,d

DOI: [10.1038/s41467-023-40831-8](https://doi.org/10.1038/s41467-023-40831-8)

图121 示例数据

反应自由能路径比较

催化比较 · 反应路径 · 自由能



本卡含 2 个展示版本；原编号：图121、图120。

在共同反应步骤与能量参照下叠放不同催化条件的自由能路径，突出**关键中间体稳定性与步骤能量变化**。适合比较催化剂或反应环境对路径的影响，并结合结构、成键和过渡态证据，寻找需要重点解释的能量节点。

独立示例数据

应用参考：竞争产物通道的反应能量路径

J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 27045-27053. Fig. 5

DOI: 10.1021/jacs.3c10782

应用参考：不同亲核试剂的Gibbs自由能路径

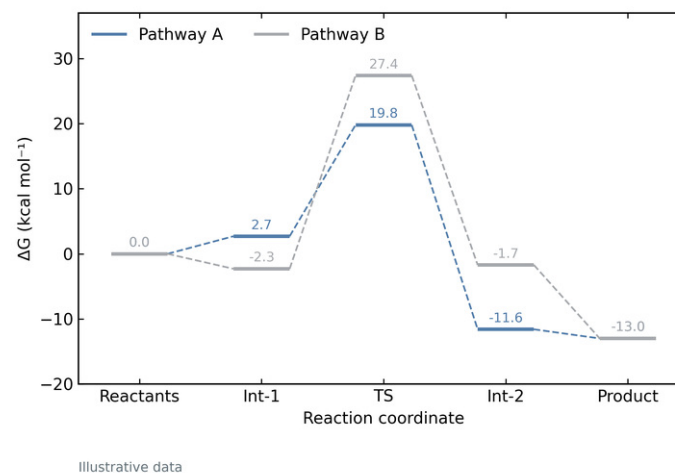
Nat. Commun. 2025, 16, 5278. Fig. 3a,b

DOI: 10.1038/s41467-025-60237-y

图015 示例数据

竞争反应路径自由能

反应路径 · 自由能 · 竞争机制



以自由能台阶对照不同反应路径，将反应物、中间体、过渡态与产物放在共同参照下，突出**关键能垒、稳定中间体及路径间的能量差异**。适合分析催化机制、区域或立体选择性，并与过渡态结构和相互作用分析配合，解释不同条件下的反应偏好。

独立示例数据。

应用参考：竞争产物通道的反应能量路径

J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 27045-27053. Fig. 5

DOI: 10.1021/jacs.3c10782

应用参考：不同亲核试剂的Gibbs自由能路径

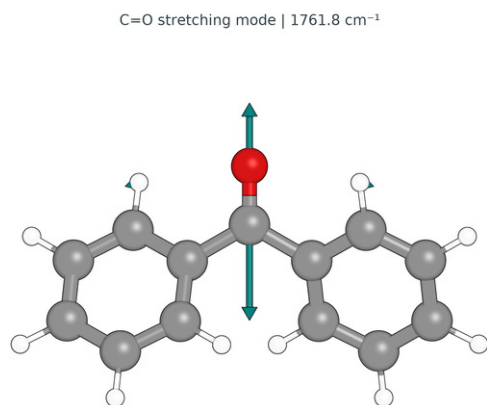
Nat. Commun. 2025, 16, 5278. Fig. 3a,b

DOI: 10.1038/s41467-025-60237-y

图060 独立计算

分子振动与位移方向

分子结构 · 几何构型



在平衡结构上用箭头标示正常振动模式中的相对位移方向，并给出对应频率。可用于辨认**官能团伸缩、弯曲与骨架协同运动**，辅助关联光谱峰和分子结构。箭头采用统一显示比例，保留同一模式内的相对位移关系。

Benzophenone · independently calculated normal mode

应用参考：核位移与电子振动耦合

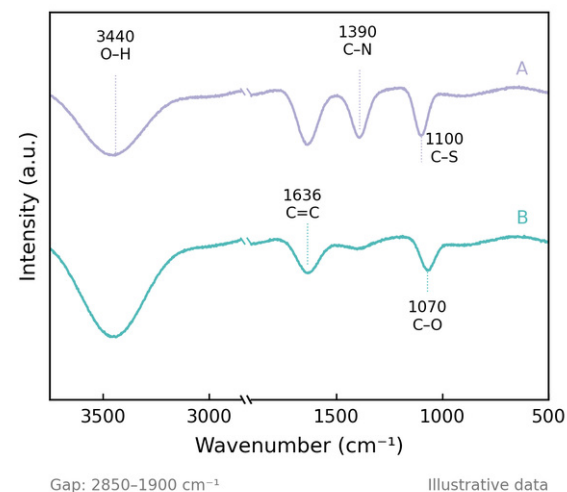
Nat. Commun. 2026, 17, 678. Fig. 2b

DOI: 10.1038/s41467-025-67342-y

图016 示例数据

红外光谱与特征振动

红外光谱 · 特征振动 · 谱峰对比



将不同体系的红外谱错位排列，并标出主要振动带，便于比较**特征峰位置、谱带变化与官能团响应**。可用于结构鉴别、成键变化或分子间作用分析，也可与计算振动频率和模式位移对应，帮助解释峰位移动、峰形差异及实验光谱中的关键变化。

独立示例数据

应用参考：原位红外谱带响应与相互作用形成

J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 6378-6383. Fig. 4A,B

DOI: 10.1021/jacs.5c00165

应用参考：实验IR位移与计算振动频率对应

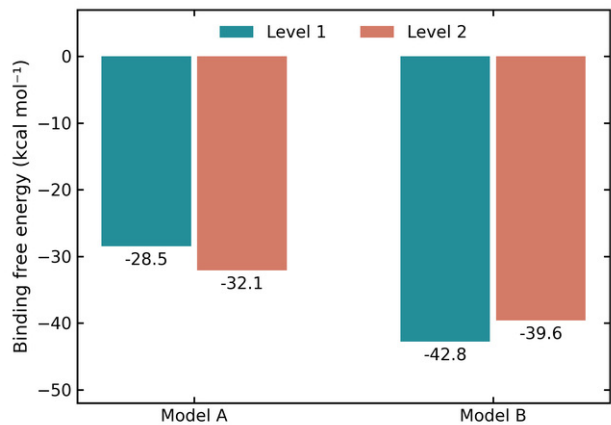
Nat. Commun. 2023, 14, 5061. Fig. 6a; Fig. 7e

DOI: 10.1038/s41467-023-40831-8

图017 示例数据

配位结合自由能比较

示例数据 · 性质比较



Illustrative data

采用**分组柱图与方法间配对**比较不同模型的结合自由能。相同模型在两种计算层级之间保持对应关系，用于观察层级选择对相对稳定性与变化方向的影响，能量单位与符号统一。

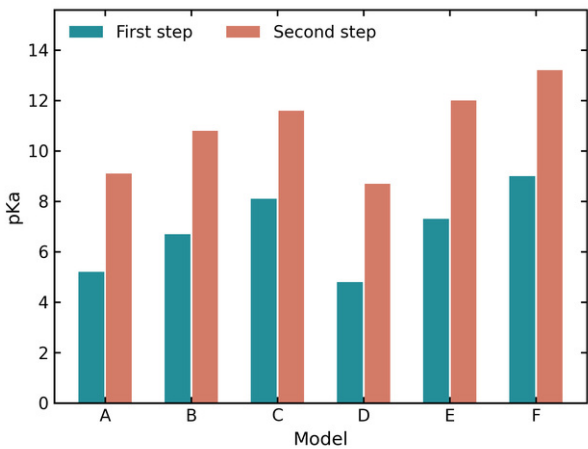
Illustrative data

应用参考：DFT分子相互作用自由能比较
Nat. Commun. 2025, 16, 2065. Fig. 5b
DOI: 10.1038/s41467-025-57325-4

图018 示例数据

多模型逐步去质子化pKa

示例数据 · 性质比较



Illustrative data

通过**不同模型与两步去质子化**的分组柱图比较酸碱性差异。同一模型的两根柱对应不同平衡步骤，模型间可比较取代基或环境影响，适合显示逐步平衡常数的相对变化。

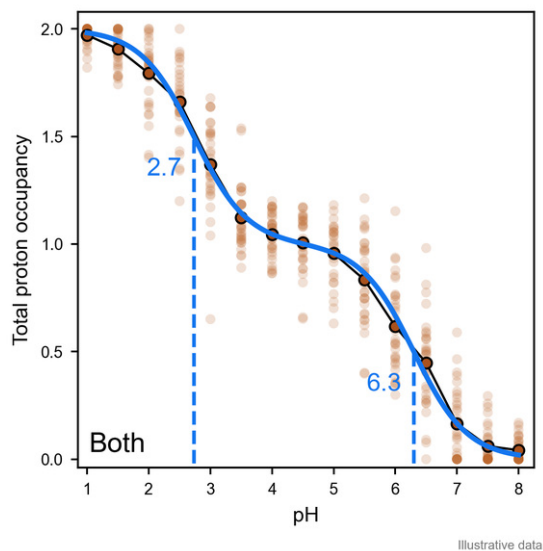
Illustrative data

画法参考：按对象并列比较两个条件的柱状数值
Nat. Commun. 2019, 10, 675. Fig. 3d
DOI: 10.1038/s41467-019-08644-w

图117 示例数据

质子占据与滴定响应

酸碱平衡 · 滴定曲线 · 质子占据



沿酸碱条件展示总质子占据数的变化，结合观测点、模型曲线和转变位置，突出**逐步去质子化与平衡区间**。适合解释多位点酸碱响应，并比较取代基、介质或配位环境对转变位置的影响，与报告酸度常数形成互补表达。

独立示例数据

画法参考：酸碱滴定点与拟合曲线的并列比较

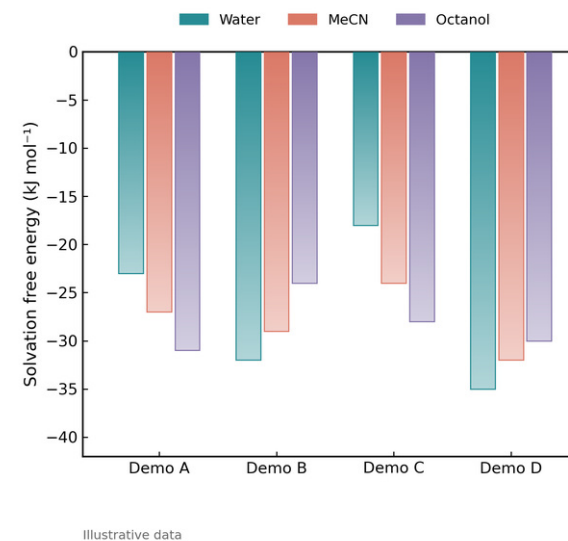
J. Am. Chem. Soc. 2010, 132, 8385-8397. Fig. 5a,b

DOI: 10.1021/ja101097p

图022 示例数据

多溶剂溶剂化自由能

溶剂效应 · 溶剂化 · 分组比较



以分组柱比较不同分子在多种溶剂中的溶剂化自由能，展示**溶剂对体系稳定化的差异及分子间的响应规律**。共同零点和一致颜色便于横向比较，可与极性、氢键及分子表面性质配合，用于讨论溶剂选择、相间转移，以及反应或分子识别中的环境效应。

独立示例数据

应用参考：有机分子在水和辛醇中的溶剂化自由能

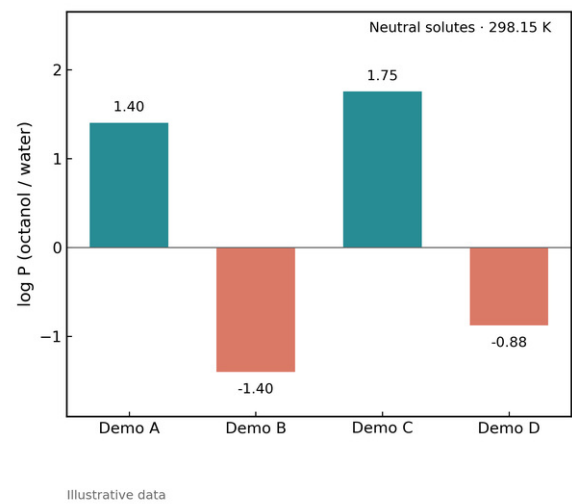
J. Am. Chem. Soc. 2026, 148, 4928-4937. Fig. 3; Fig. 6

DOI: 10.1021/jacs.5c10940

图178 示例数据

溶剂化自由能与分配系数

溶剂化 · 分配系数 · 相间转移



以同源溶剂化自由能差推导中性分子的水与有机相分配系数，直观比较**相间转移偏好及其热力学尺度**。适用于溶剂选择和分子性质筛选，可与多溶剂自由能矩阵、结构及表面极性结果对应，说明不同体系的环境响应。

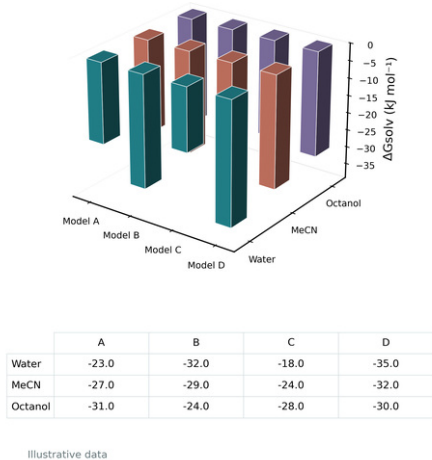
独立示例数据

应用参考：由水与辛醇溶剂化自由能获得分配系数
J. Am. Chem. Soc. 2026, 148, 4928-4937. Fig. 7
DOI: 10.1021/jacs.5c10940

图281 示例数据

多模型溶剂化自由能三维柱图

示例数据 · 性质比较



以**模型与溶剂交叉排列**比较溶剂化自由能。负柱从负值延伸至零，第三轴保留正负号和统一单位；数值表可辅助观察不同溶剂中稳定化程度与模型间变化。

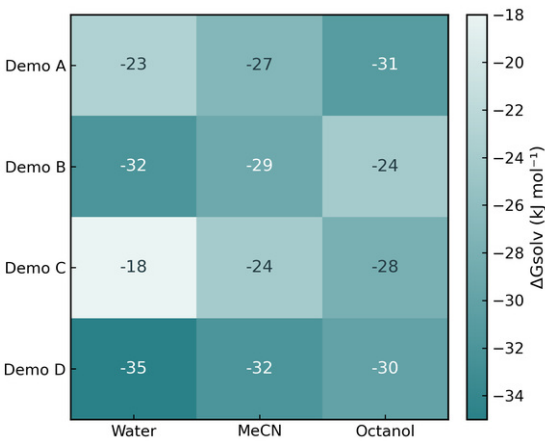
Illustrative data

应用参考：有机分子在水和辛醇中的溶剂化自由能
J. Am. Chem. Soc. 2026, 148, 4928-4937. Fig. 3; Fig. 6
DOI: 10.1021/jacs.5c10940

图069 示例数据

多溶剂溶剂化自由能矩阵

溶剂效应 · 自由能 · 体系对照



Illustrative data

以分子体系与溶剂构成二维矩阵，用统一色阶和数值显示溶剂化自由能，突出**同一分子的溶剂偏好与不同分子的响应差异**。适合比较极性、官能团或环境对溶剂稳定作用的影响，并与分配行为、反应热力学及分子表面性质共同解释。

独立示例数据

应用参考：有机分子在水和辛醇中的溶剂化自由能

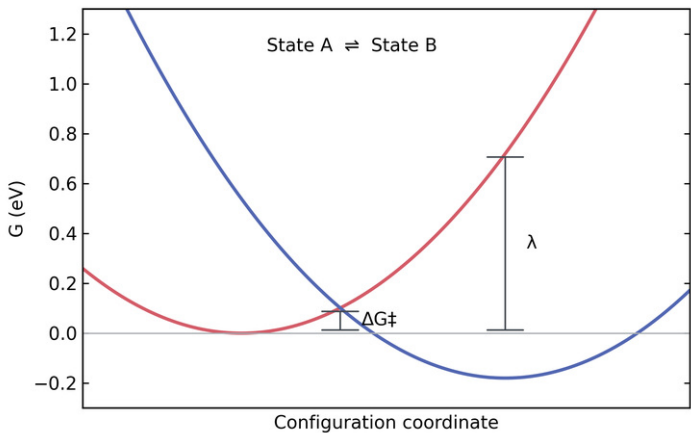
J. Am. Chem. Soc. 2026, 148, 4928-4937. Fig. 3; Fig. 6

DOI: 10.1021/jacs.5c10940

图108 示例数据

电子转移自由能面与重组能

电子转移 · 重组能 · 自由能面



Illustrative data

以沿反应坐标的自由能曲线展示不同电荷态的能量响应，标出**平衡构型、交叉区域与重组能**。适合说明电子转移中的核构型调整，并比较驱动力和曲率变化对势垒的影响，为电荷传输与反应动力学讨论提供直观参照。

独立示例数据。

应用参考：Marcus双势能抛物线与态间转换

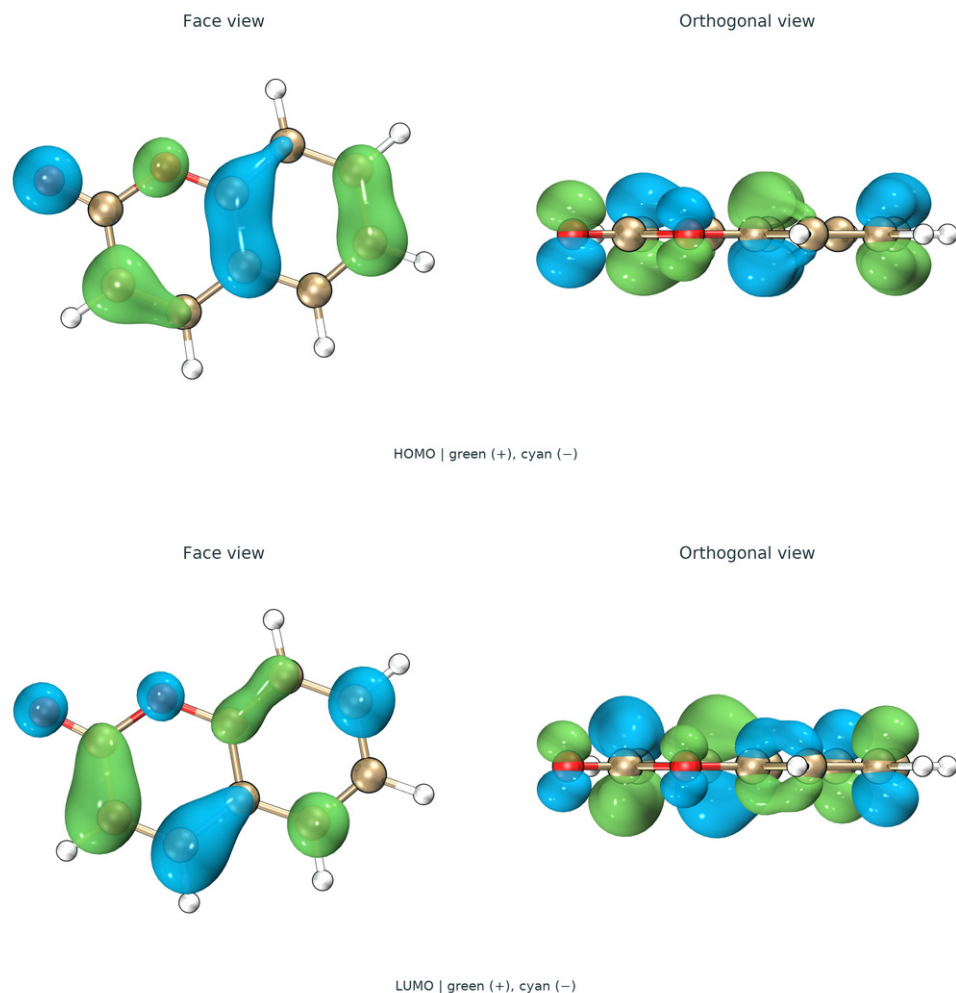
Nat. Commun. 2023, 14, 3657. Fig. 5b

DOI: 10.1038/s41467-023-39198-7

图056 独立计算

前线轨道空间分布

空间场 · 电子结构



本卡含 3 个展示版本；原编号：图056、图061、图157、图285、图286。

用两种颜色区分轨道波函数的正负相位，展示其在分子骨架与官能团上的空间分布。可用于比较**轨道离域范围、节点与局域特征**，并与结构、能级和跃迁分析对应，辅助理解分子的电子结构。

Coumarin · independent quantum-chemical field

画法参考：前线分子轨道等值面的空间分布

J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 18431-18437. Fig. 4B

DOI: [10.1021/jacs.5c04487](https://doi.org/10.1021/jacs.5c04487)

应用参考：HOMO及LUMO与成键/反键性质

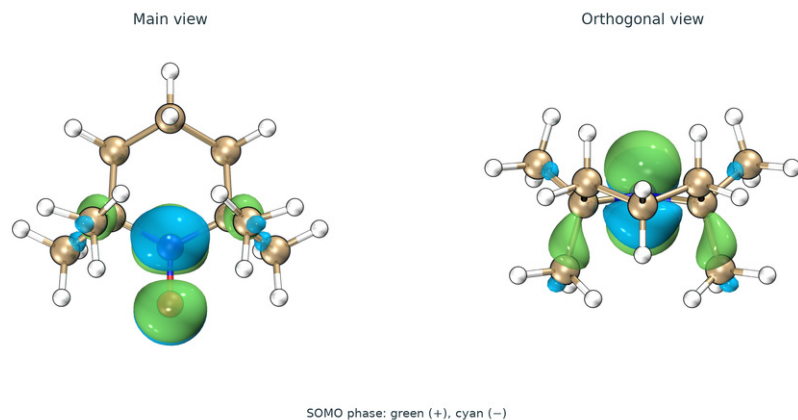
Nat. Commun. 2026, 17, 1937. Fig. 3

DOI: [10.1038/s41467-026-69607-6](https://doi.org/10.1038/s41467-026-69607-6)

图287 独立计算

单占轨道的多视角分布

单占轨道 · 自由基



本卡含 2 个展示版本；原编号：图287、图288。

以正负相位双色等值面展示开壳层分子的单占据轨道。互补视角帮助辨认**轨道节点、空间取向与离域范围**，可与自旋密度等结果并列，从轨道和密度两个层面理解未成对电子的空间特征。

tempo · independent quantum-chemical field

画法参考：自由基单占据轨道的空间分布

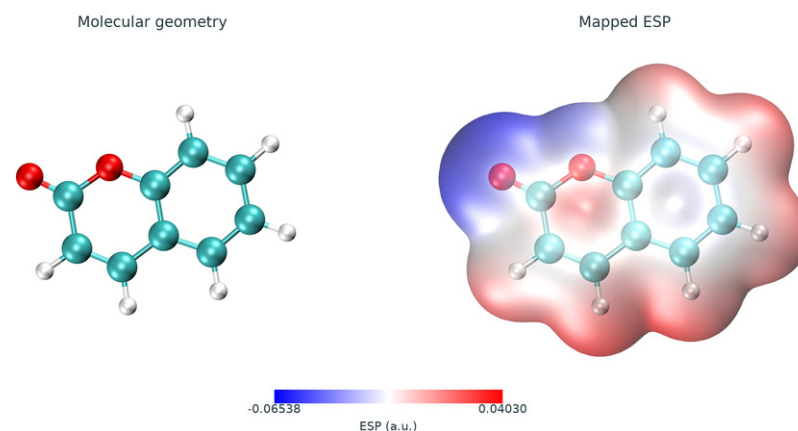
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 18431-18437. Fig. 4A

DOI: 10.1021/jacs.5c04487

图057 独立计算

分子静电势与结构对照

静电势 · 表面映射



本卡含 2 个展示版本；原编号：图057、图155。

把分子静电势映射到电子密度等值面，以连续色阶表现表面电势的差异。结合内部骨架或并列结构图，可定位**相对富电子与贫电子区域**，辅助讨论分子识别、局部极性及可能的静电互补关系。

Coumarin · independent quantum-chemical field

应用参考：以表面静电势辨认静电互补区域

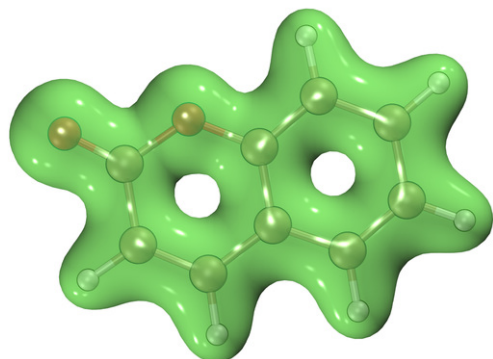
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 6378-6383. Fig. 1C; Fig. 3D

DOI: 10.1021/jacs.5c00165

图065 独立计算

电子密度等值面

空间场 · 电子结构

Total electron density | isovalue: 0.05 e/Bohr³

以等值面显示电子密度达到给定阈值的空间轮廓，并保留内部原子骨架作为定位参照。可用于观察**电子云形状与分子骨架的对应**，在统一阈值下比较不同区域的空间延伸与紧凑程度。

Coumarin · independent quantum-chemical field

画法参考：电子密度等值面与分子构型对应

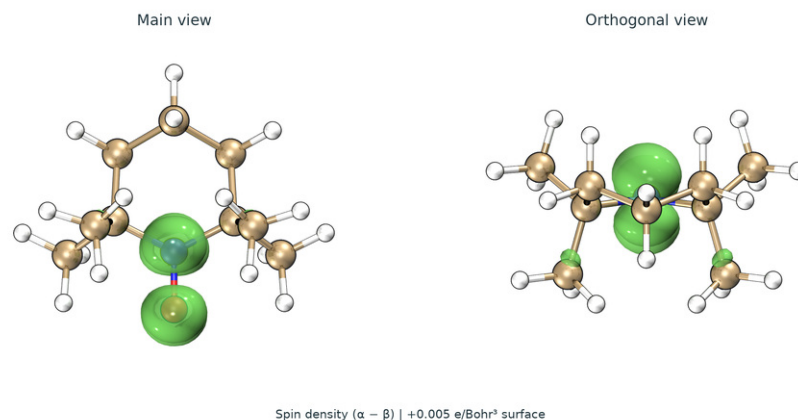
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 6378-6383. Fig. 3C

DOI: 10.1021/jacs.5c00165

图289 独立计算

自旋密度双视角分布

自旋密度 · 自由基

Spin density ($\alpha - \beta$) | +0.005 e/Bohr³ surface

用自旋密度等值面展示 α 与 β 电子密度之差在分子骨架上的空间分布。互补视角有助于观察**自旋局域与离域特征**，并与单占据轨道或原子自旋布居对照，辅助讨论自由基的电子结构。本例呈现所选正值阈值对应的区域。

tempo · independent quantum-chemical field

应用参考：自由基的自旋密度空间分布

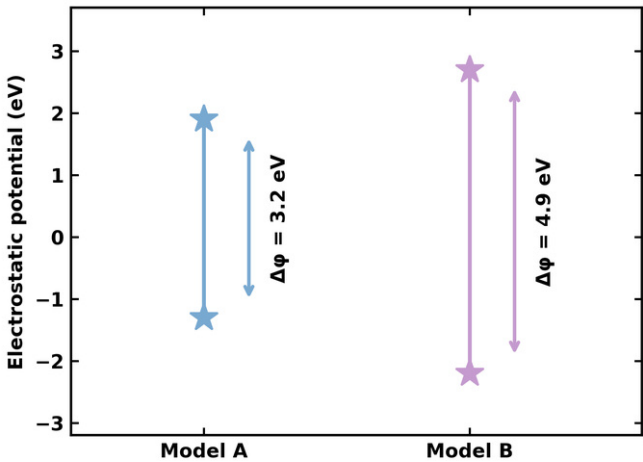
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 18431-18437. Fig. 4C

DOI: 10.1021/jacs.5c04487

图114 示例数据

静电势极值与跨度比较

静电势 · 正负极值 · 电势跨度



Illustrative data

并列标记静电势的最小值、最大值及其跨度，使**正负电势范围与结构间差异**清晰可读。适合比较分子表面的极性分布，并与静电势表面、反应位点及非共价接触分析配合，为识别潜在相互作用区域提供定量参照。

独立示例数据

应用参考：表面正负静电势与结构变化

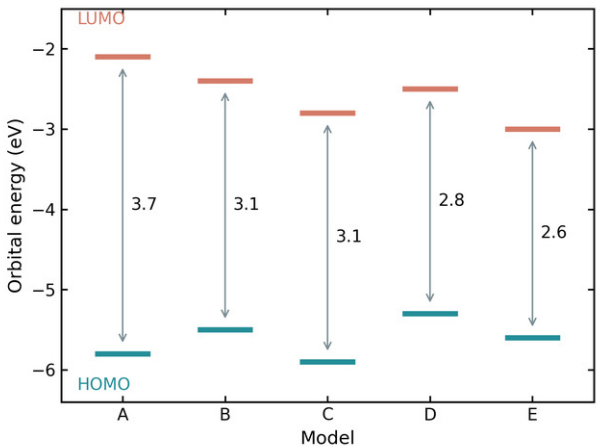
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 6378-6383. Fig. 1C; Fig. 3D

DOI: 10.1021/jacs.5c00165

图283 示例数据

HOMO–LUMO能级与能隙比较

示例数据 · 性质比较



Illustrative data

将**HOMO、LUMO能级及两者间隙**并列展示，比较模型的前线轨道位置及能隙变化。能级线使用统一参照，箭头标注轨道能量差，可与电子分布和氧化还原性质关联讨论。

Illustrative data

画法参考：统一真空参照下的分子能级排列

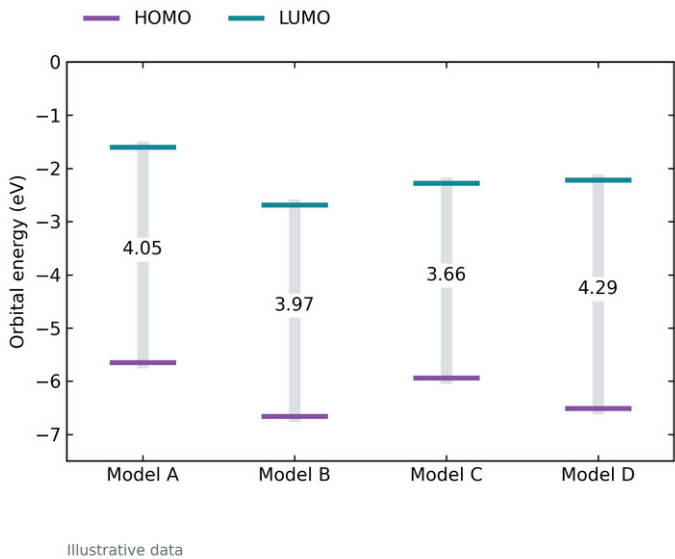
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 34089-34100. Fig. 7

DOI: 10.1021/jacs.5c12438

图023 示例数据

前线轨道能级与间隙

前线轨道 · 能级排列 · 轨道间隙



将不同体系的HOMO与LUMO放在统一能量参照下，并标出轨道间隙，比较**占据轨道、空轨道及二者能量差的变化**。适合说明分子修饰、配位或电荷状态对电子结构的影响，可与轨道空间分布、氧化还原性质和光谱分析配合，组织结构与性质之间的关系。

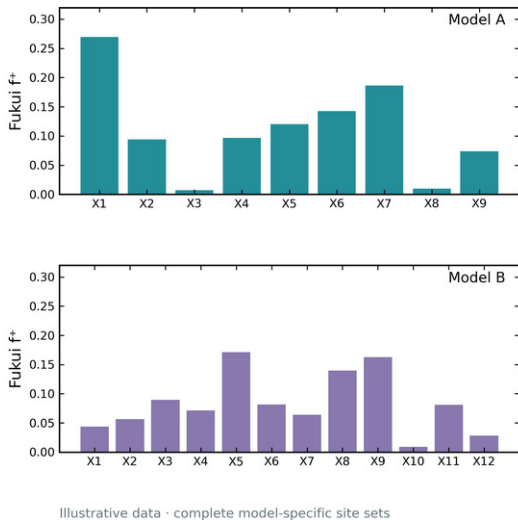
独立示例数据。

画法参考：统一真空参照下的分子能级排列
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 34089-34100. Fig. 7
DOI: 10.1021/jacs.5c12438

图019 示例数据

原子Fukui指数分布

示例数据 · 性质比较



以**原子位点的Fukui指数分布**比较局部反应性。不同模型分别呈现其完整位点集合，统一坐标尺度用于观察主要活性位置与贡献分布；位点编号仅用于演示模型内部对应。

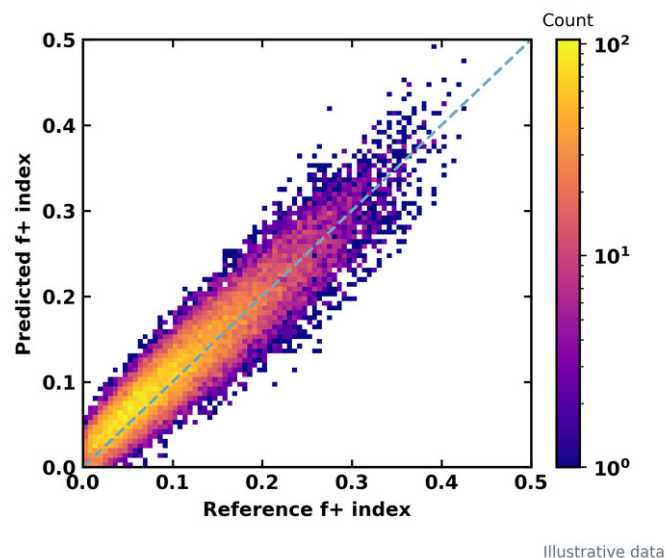
Illustrative data

应用参考：原子Fukui指数与区域选择性
Nat. Commun. 2025, 16, 5278. Fig. 2a
DOI: 10.1038/s41467-025-60237-y

图115 示例数据

原子反应性指标一致性

反应性 · 密度散点 · 一致性



用密度散点展示两套原子反应性指标之间的对应关系，通过颜色表示各数值区间的点数，并结合等值参照线观察**整体一致性、离散程度和局部偏差**。适合比较预测结果与参照指标的分布，识别不同数值区间的偏离特征，并为位点反应性分析提供校验视角。

独立示例数据

应用参考：用Fukui原子反应性指标比较位点选择性

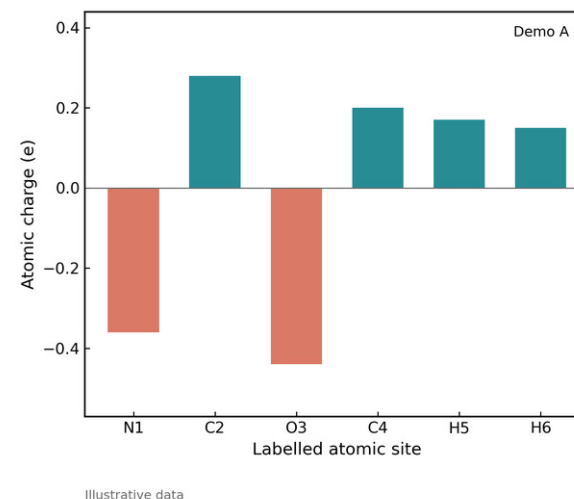
Nat. Commun. 2025, 16, 5278. Fig. 2a

DOI: 10.1038/s41467-025-60237-y

图020 示例数据

原子电荷正负分布

原子电荷 · 电荷分布 · 正负对比



以零点为中心展示不同原子的电荷，直观区分**电子相对富集与缺乏的原子区域**。正负颜色与原子编号配合，适合比较取代、配位或质子化带来的局部电荷变化；与分子结构、静电势和键级分析结合，可解释极性分布、分子识别及反应位点的电子特征。

独立示例数据

应用参考：NPA原子电荷与电子态变化

Nat. Commun. 2026, 17, 1937. Fig. 4c; Fig. 5

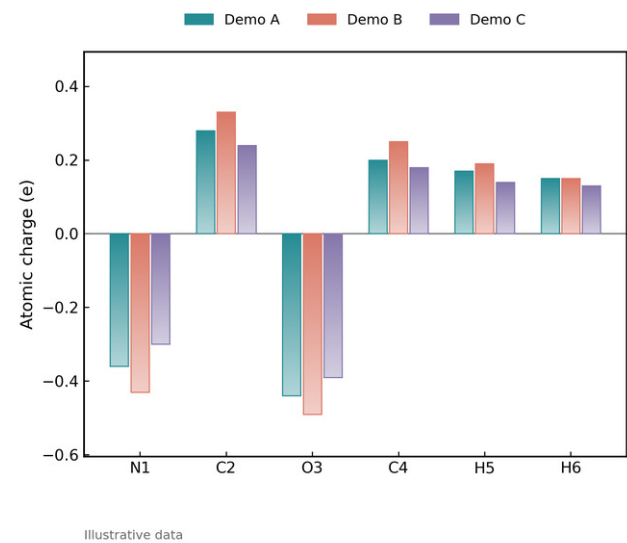
DOI: 10.1038/s41467-026-69607-6

分子DFT电子结构与分子性质

图066示例数据

跨体系原子电荷并列比较

原子电荷 · 并列比较 · 局部极化



以对应原子位点为横轴，将不同体系的原子电荷用三组并列柱展示，突出**同一点点的极化变化与正负电荷分布**。统一零点、系列颜色和柱内渐变便于比较，可与几何、键级和静电势结合，讨论结构修饰或环境变化引起的电子重排。

独立示例数据

应用参考：NPA原子电荷与电子态变化

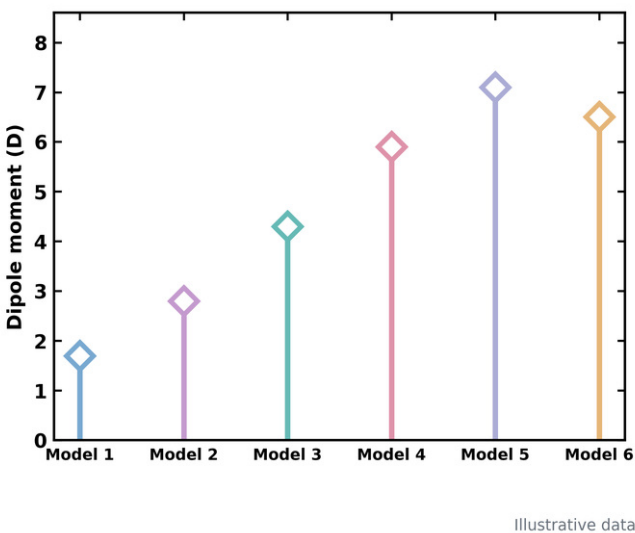
Nat. Commun. 2026, 17, 1937. Fig. 4c; Fig. 5

DOI: 10.1038/s41467-026-69607-6

图113示例数据

分子偶极矩比较

偶极矩 · 分子极性 · 分类比较



以棒线和端点标记并列展示分子偶极矩，突出**不同结构的极性差异与变化方向**。适合比较取代基、构象或环境对分子极性的影响，并与静电势、电荷分布和界面排列结合，解释分子识别、溶剂响应及电场相关性质。

独立示例数据

画法参考：离散数值的棒线比较

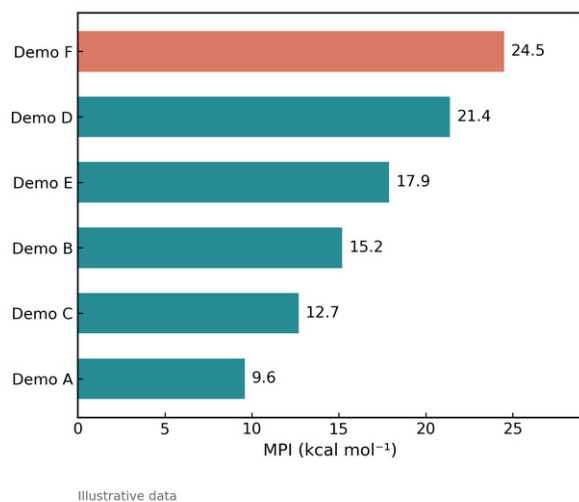
Nat. Commun. 2026, 17, 678. Fig. 1d-f

DOI: 10.1038/s41467-025-67342-y

图171 示例数据

分子表面极性指数排名

表面极性 · MPI · 性质排名



将分子表面极性指数按大小排列，直接比较**平均表面静电势绝对值所反映的极性水平**。适用于不同分子、取代或构型的性质筛选，可与静电势表面和其他电子性质对应，帮助定位表面响应差异较明显的候选体系。

独立示例数据

画法参考：按数值排序的水平条形比较

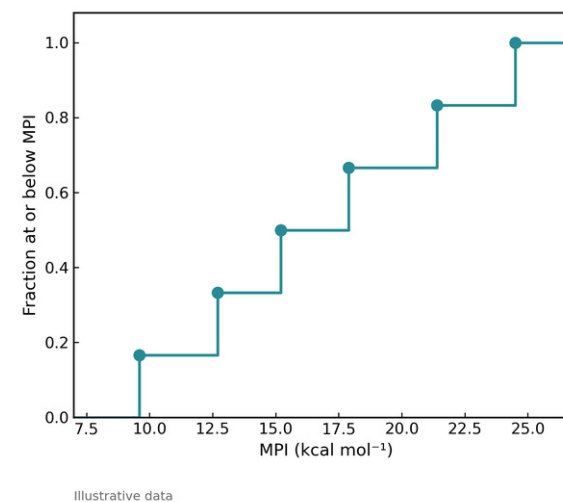
Nat. Mach. Intell. 2020, 2, 56-67. Fig. 4a (left)

DOI: 10.1038/s42256-019-0138-9

图172 示例数据

表面极性指数累积分布

表面极性 · 累积分布 · 候选分布



以经验累积分布显示分子表面极性指数在候选集合中的分布，观察**指标集中区间与阈值以下的比例**。适用于评估筛选集合的整体差异，可与排名图和表面静电势实例配合，为性质区间选择及候选比较提供直观依据。

独立示例数据

画法参考：用经验累积分布呈现阈值以下的样本比例

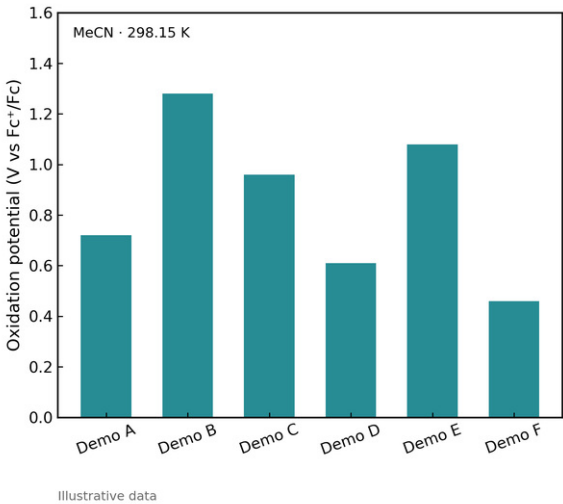
Nat. Commun. 2018, 9, 171. Fig. 7a-c

DOI: 10.1038/s41467-017-02213-9

图173 示例数据

统一参比氧化电势

氧化电势 · 统一参比 · 电子转移



在统一参比与溶液条件下比较不同体系的氧化电势，突出**电子移除的相对热力学难易**。适用于分子修饰和候选筛选，可与氧化自由能、前线轨道及溶剂化结果配合，分析结构变化对溶液氧化性质的影响。

独立示例数据

画法参考：不同对象的标量并列柱比较

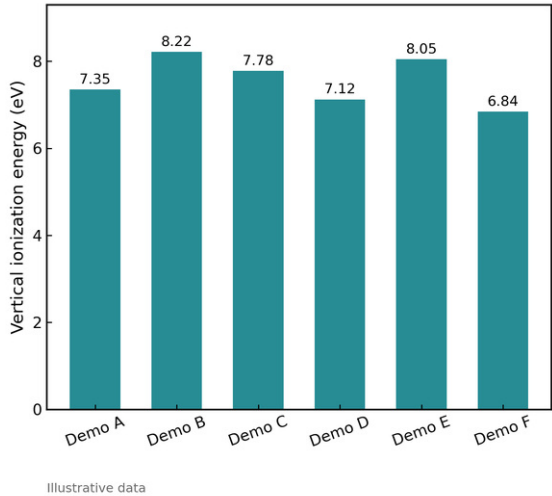
Nat. Commun. 2026, 17, 4858. Fig. 4b

DOI: 10.1038/s41467-026-71445-5

图174 示例数据

垂直电离能比较

垂直电离 · 电子移除 · 性质比较



以柱图展示不同分子的垂直电离能，直观比较**固定中性几何时移除电子所需的能量**。零基线与直接数值标注便于比较绝对量级及体系差异，可与前线轨道、带电态结构和氧化还原性质关联，呈现不同电子性质之间的联系。

独立示例数据

画法参考：分类标量柱图与直接数值比较

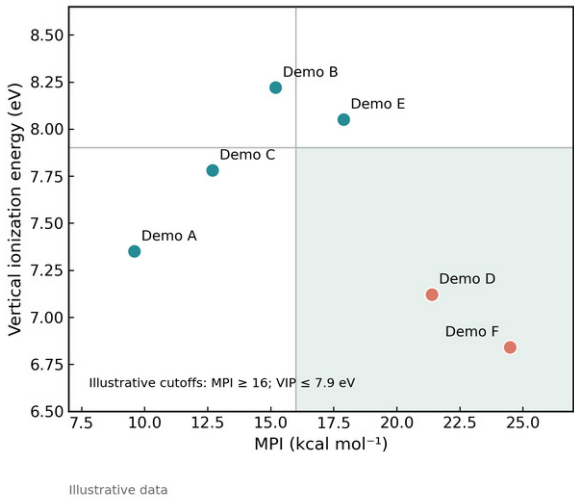
Nat. Commun. 2026, 17, 4858. Fig. 4b

DOI: 10.1038/s41467-026-71445-5

图175 示例数据

候选分子双指标筛选

双指标 · 候选筛选 · 阈值比较



将同一候选集合的表面极性指数与垂直电离能放在散点图中，并用阈值区域突出**同时满足不同性质要求的候选**。适用于多目标筛选和性质权衡，可调整筛选条件、追踪候选标签，并与各单指标排名形成对应。

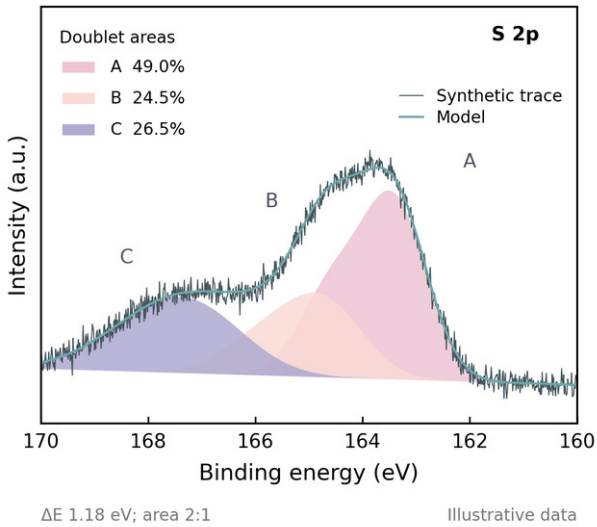
独立示例数据

画法参考：二维散点中的多对象指标比较
Nat. Commun. 2025, 16, 11406. Fig. 8d
DOI: 10.1038/s41467-025-66220-x

图123 示例数据

自旋轨道双峰谱分解

光电子谱 · 双峰分解 · 峰面积



将总谱、背景与受约束的双峰组分放在同一能量坐标下，突出**峰位、重叠关系与组分面积比例**。适合组织不同化学环境的光电子谱解析，并结合成键和电荷信息解释谱峰变化，帮助读者将拟合组分与电子结构分析对应。

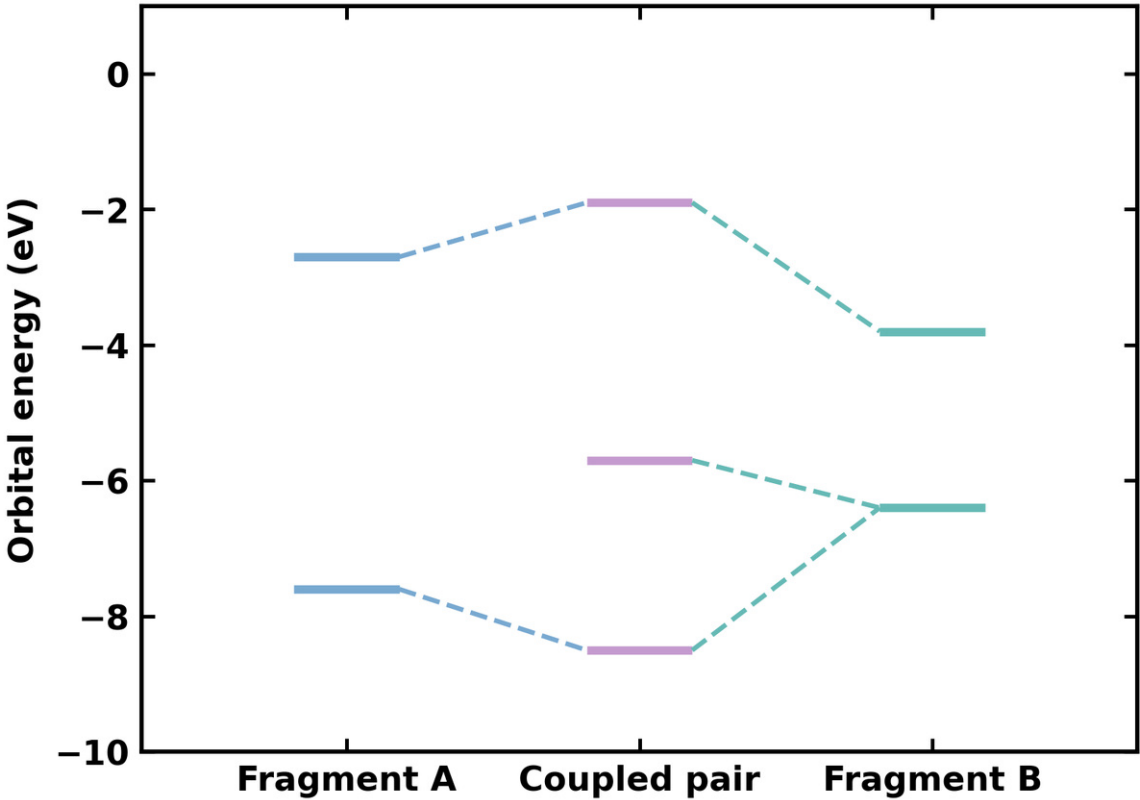
独立示例数据

画法参考：XPS谱线、总拟合与分峰填色
Nat. Mater. 2010, 9, 430-435. Fig. 3a-c
DOI: 10.1038/nmat2711

图116 示例数据

片段轨道能级排列

片段轨道 · 能级排列 · 成键关联



Illustrative data

将不同片段与组合体系的轨道能级并列排列，并以虚线表示示意性的轨道对应，突出**能量匹配、能级分裂与可能的成键联系**。适合组织分子或配位片段之间的电子结构比较，并结合轨道成分、电荷转移及键级结果讨论成键机制。

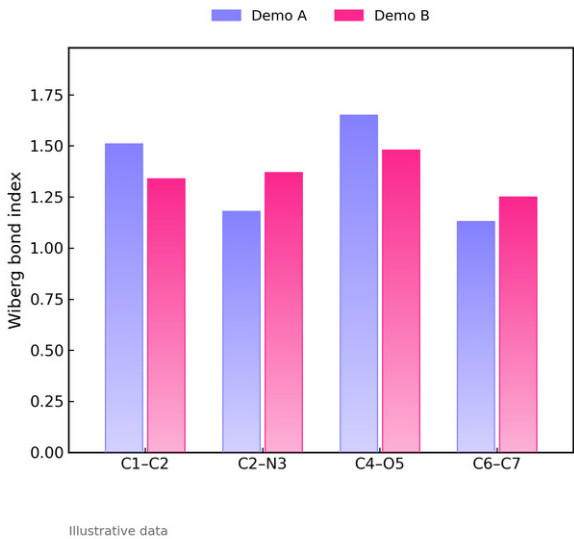
独立示例数据

画法参考：共用能量纵轴的离散能级排列
J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 34089-34100. Fig. 7
DOI: [10.1021/jacs.5c12438](https://doi.org/10.1021/jacs.5c12438)

图021 示例数据

双体系键级并列比较

成键分析 · 双组比较 · 键级变化



将对应化学键的键级用两组并列柱展示，直接比较**不同体系的成键指标及局部变化幅度**。统一零基线和系列颜色便于读取绝对量级与差异，可结合键长、电子密度及轨道相互作用，解释结构修饰、配位或电子转移引起的成键变化。

独立示例数据

应用参考：不同氧化态的Wiberg键级比较

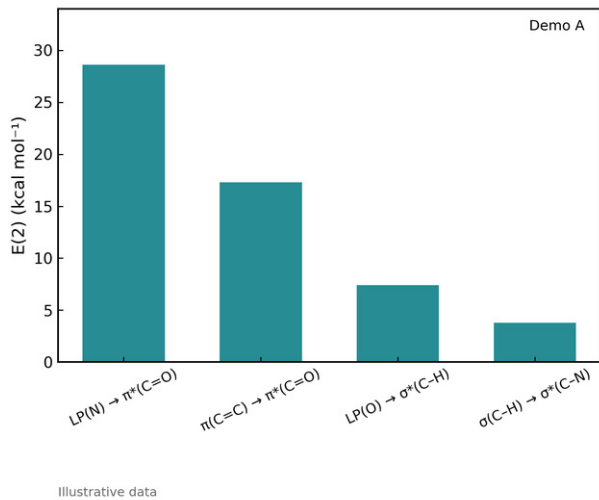
Nat. Commun. 2026, 17, 1937. Fig. 2c; Fig. 4c; Fig. 5

DOI: 10.1038/s41467-026-69607-6

图067 示例数据

供受轨道稳定化能

供受轨道 · 稳定化能 · 强度排序



按供受轨道相互作用的二阶稳定化能排列柱图，使**主导电子给受作用及其相对强度**一目了然。轨道标签便于联系孤对、成键与反键轨道，可与键长、构象及轨道图共同阅读，说明离域作用或超共轭对分子结构稳定性的贡献。

独立示例数据

应用参考：NBO供受轨道二阶稳定化能

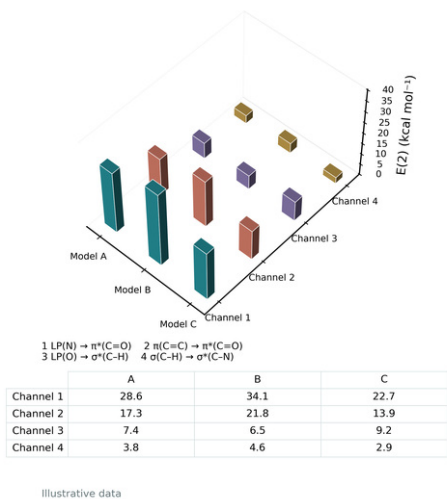
Nat. Commun. 2017, 8, 78. Fig. 2c,d,f; Table 1

DOI: 10.1038/s41467-017-00081-x

图280 示例数据

供受轨道稳定化能三维柱图

示例数据 · 性质比较



通过**模型与供受轨道通道的三维柱高**比较稳定化能。两条分类轴分别对应模型和作用通道，第三轴保持能量单位，下方数值表支持精确读取并与矩阵或分组柱表达对照。

Illustrative data

应用参考：NBO供受轨道二阶稳定化能

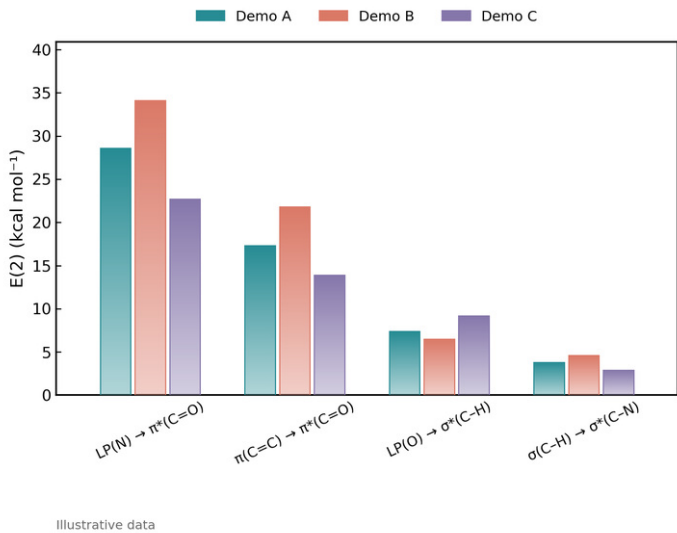
Nat. Commun. 2017, 8, 78. Fig. 2c,d,f; Table 1

DOI: 10.1038/s41467-017-00081-x

图068 示例数据

供受轨道稳定化能并列比较

供受轨道 · 并列比较 · 稳定化能



以相同供受轨道作用为横轴，用三组并列柱比较不同体系的二阶稳定化能，突出**主导通道与跨体系强弱变化**。系列颜色区分体系，柱内渐变保留清楚的高度读数，适合联系关键几何与轨道形貌，讨论结构或环境对电子离域的影响。

独立示例数据

应用参考：NBO供受轨道二阶稳定化能

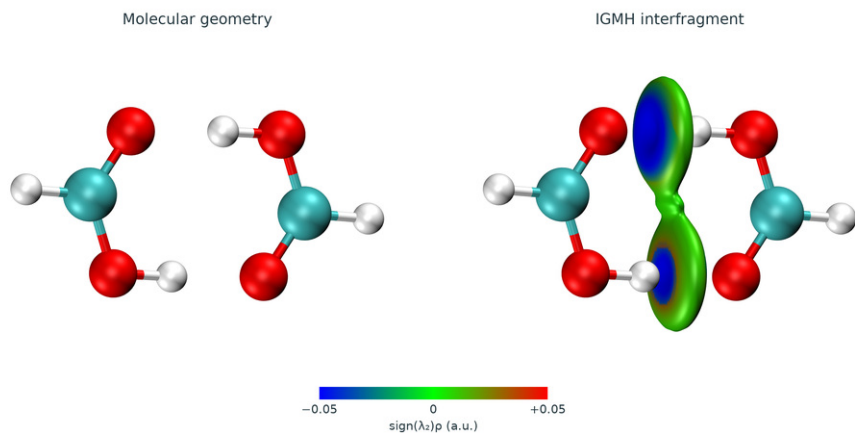
Nat. Commun. 2017, 8, 78. Fig. 2c,d,f; Table 1

DOI: 10.1038/s41467-017-00081-x

图028 独立计算

IGMH分子间相互作用

相互作用 · 空间场



本卡含 2 个展示版本；原编号：图028、图156。

将分子间IGMH等值面与分子骨架对应，定位不同片段之间的接触区域。表面颜色结合 $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ 区分不同密度特征，适合辅助讨论氢键等非共价接触的空间分布，并与几何参数及独立能量分析相互印证。

formic acid dimer · independent quantum-chemical field

应用参考：IGMH分子间接触等值面和双视角

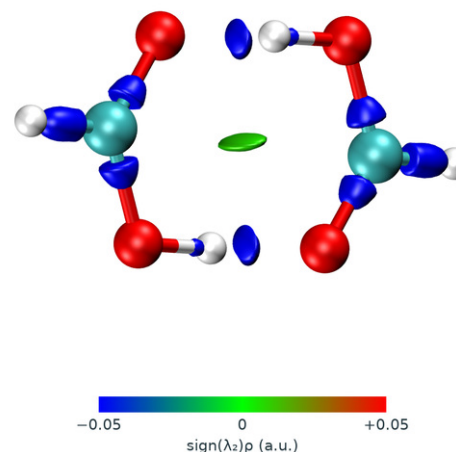
Nat. Commun. 2025, 16, 9718. Fig. 5c,d

DOI: 10.1038/s41467-025-64739-7

图064 独立计算

IRI相互作用指标表面

相互作用 · 空间场



用IRI等值面同时观察分子内成键与分子间接触区域，并以 $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ 着色辅助辨认其密度特征。结构与表面的空间对应可帮助定位相互作用区域，适合与其他电子结构指标结合，形成多角度的成键与接触分析。

formic acid dimer · independent quantum-chemical field

画法参考：以结构叠合着色相互作用表面定位分子接触

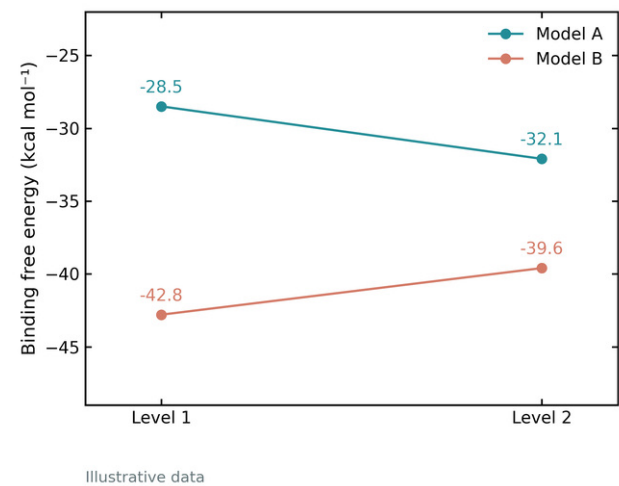
Nat. Commun. 2025, 16, 9718. Fig. 5c,d

DOI: 10.1038/s41467-025-64739-7

图160 示例数据

配位结合自由能配对

示例数据 · 性质比较



采用**配对折线**比较不同模型的结合自由能。相同模型在两种计算层级之间保持对应关系，用于观察层级选择对相对稳定性与变化方向的影响，能量单位与符号统一。

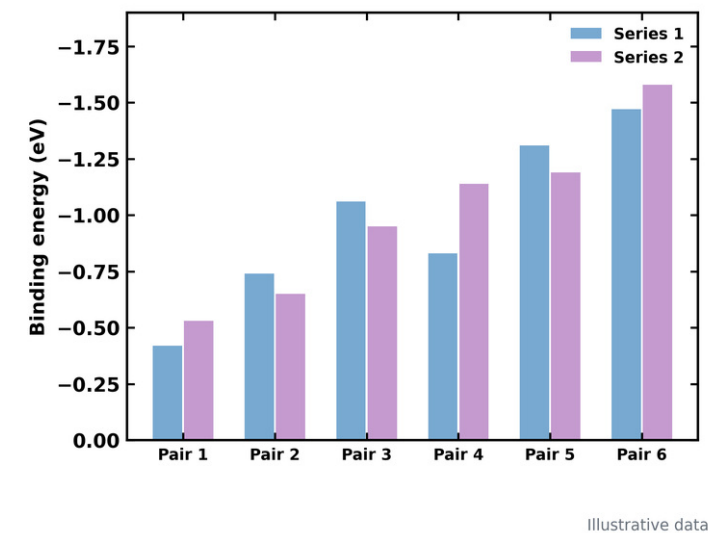
Illustrative data

应用参考：DFT分子相互作用自由能比较
Nat. Commun. 2025, 16, 2065. Fig. 5b
DOI: 10.1038/s41467-025-57325-4

图122 示例数据

不同组分的结合能比较

结合能 · 组分比较 · 相互作用



用成组柱状图比较不同组分与相互作用对象的结合能，使**结合强弱、组成效应与组间差异**清楚呈现。适合筛选配体或添加剂，并与相互作用构型、静电势及电子结构分析配合，说明能量趋势背后的结构与成键因素。

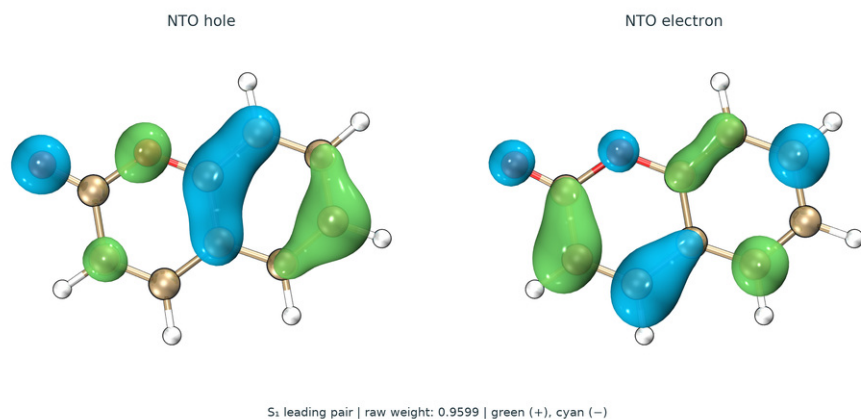
独立示例数据

应用参考：两个缔合构型的Gibbs自由能比较
J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 27045-27053. Fig. 4
DOI: 10.1021/jacs.3c10782

图002 独立计算

自然跃迁轨道：NTO轨道对

跃迁轨道 · 激发态



以自然跃迁轨道对概括特定激发态的主要电子跃迁成分。空穴轨道与电子轨道并列，有助于辨认**跃迁涉及的空间区域与离域特征**；结合该轨道对的权重，可判断其对激发态表征的代表程度。

Coumarin · independent quantum-chemical field

画法参考：并列NTO轨道对

Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202415056. Fig. 7b,c

DOI: [10.1002/anie.202415056](https://doi.org/10.1002/anie.202415056)

应用参考：以NTO及权重表征激发态

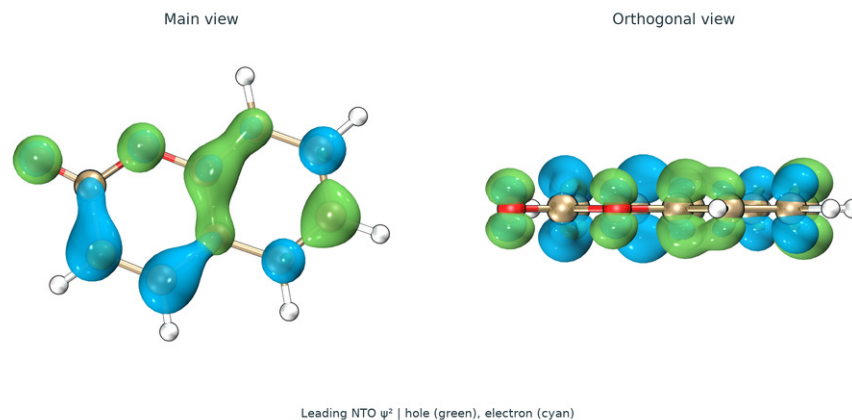
Nat. Commun. 2024, 15, 1596. Fig. 2a,b

DOI: [10.1038/s41467-024-45497-4](https://doi.org/10.1038/s41467-024-45497-4)

图058 独立计算

主导NTO对轨道概率密度

轨道概率 · 激发态



本卡含 2 个展示版本；原编号：图058、图158。

将特定激发态主导NTO对的空穴轨道与电子轨道**概率密度 ψ^2** 以两种颜色显示，观察它们的空间位置与重叠。该图概括主导轨道对的分布特征，可与NTO双相轨道图配合阅读；不同颜色表示两条轨道的身份。

coumarin · leading NTO orbital probabilities

应用参考：主导空穴/电子NTO对

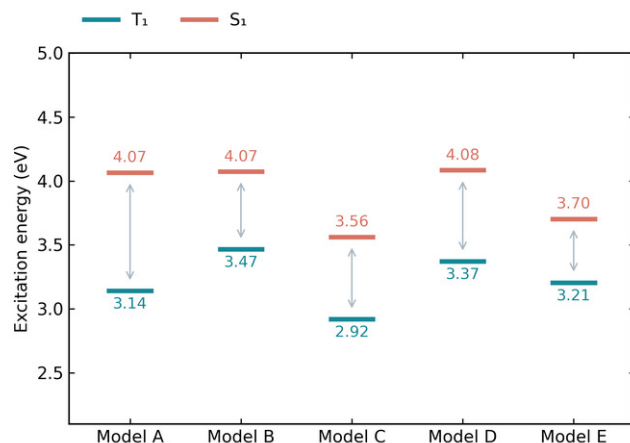
Nat. Commun. 2024, 15, 1596. Fig. 2a,b

DOI: [10.1038/s41467-024-45497-4](https://doi.org/10.1038/s41467-024-45497-4)

图180 示例数据

单重态与三重态能级比较

激发能 · 单重三重 · 能级比较



Illustrative data

将 S_1 和 T_1 能量画成并列能级线，在统一参照下比较不同模型的两态位置和相对间隔。上、下两组能级分别使用固定颜色，直接数值便于区分整体能量移动与单重态-三重态能隙变化。

独立示例数据。

应用参考：比较单重态/三重态能级与能隙

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

画法参考：单三重态能级关系

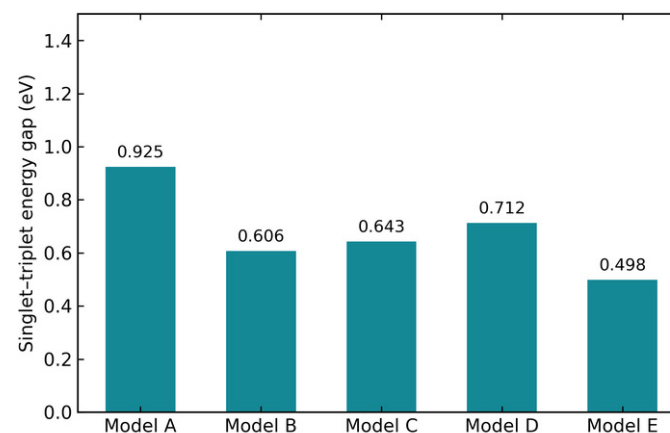
Nature 2022, 609, 502-506. Fig. 1a

DOI: 10.1038/s41586-022-05132-y

图181 示例数据

单重态-三重态能隙比较

单重三重 · 能隙比较 · 激发态



Illustrative data

以同一模型顺序的柱图比较 S_1-T_1 能隙，与两态能级图逐项对应。柱高从零开始并标出能量差，便于定位能隙较小或较大的体系，为讨论激发态过程提供能量依据。

独立示例数据。

应用参考：比较单重态/三重态能级与能隙

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

画法参考：单三重态能级关系

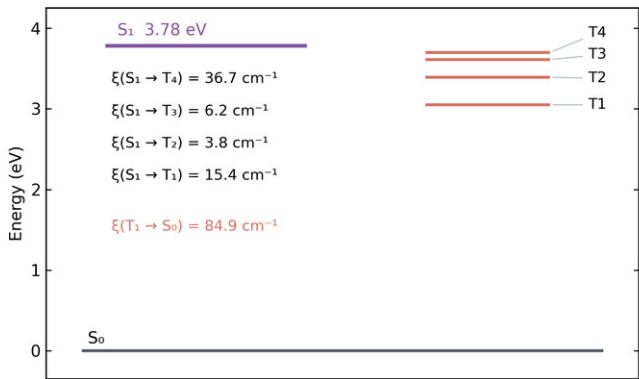
Nature 2022, 609, 502-506. Fig. 1a

DOI: 10.1038/s41586-022-05132-y

图105 示例数据

自旋轨道耦合能级通道

能级图 · 态间耦合 · 跃迁通道



Illustrative data

将单重态与三重态能级及耦合通道放在同一图中，突出**不同态对的能量关系与耦合强弱**。适合梳理系间窜越和磷光过程，并与激发态组成、振动耦合及速率结果对应，说明可参与光物理过程的主要电子态。

独立示例数据。

应用参考：能级与态间SOC联合分析

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：能隙及SOC通道比较

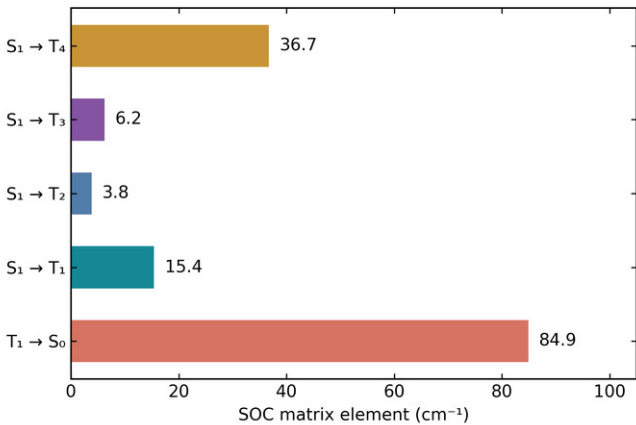
Nat. Commun. 2018, 9, 3044. Fig. 3c-e

DOI: 10.1038/s41467-018-05476-y

图186 示例数据

态间自旋轨道耦合比较

自旋耦合 · 态间通道 · 强弱比较



Illustrative data

以分类柱图排列不同态间通道的自旋轨道耦合矩阵元，用一致配色和直接标值突出**各通道的耦合强弱**。适用于梳理单重态与三重态之间的耦合结果，并可与能隙、能级方案及速率分析对应，组织激发态通道比较。

独立示例数据。

应用参考：能级与态间SOC联合分析

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：能隙及SOC通道比较

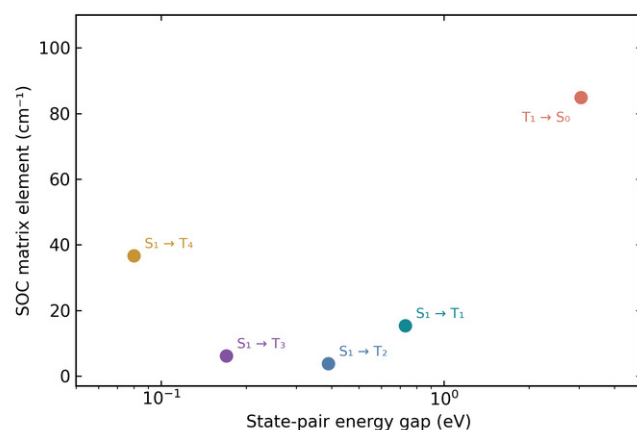
Nat. Commun. 2018, 9, 3044. Fig. 3c-e

DOI: 10.1038/s41467-018-05476-y

图074 示例数据

态间能隙与SOC联合分布

态间能隙 · 自旋耦合 · 通道对照



Illustrative data

将同一组态间通道的能隙与自旋轨道耦合矩阵元放在双指标散点图中，用对数能隙轴兼顾不同尺度，突出**近共振通道与较强耦合是否同时出现**。适合联系激发态性质、振动贡献及跃迁速率分析，比较各通道参与自旋转换的电子结构条件。

独立示例数据。

应用参考：能级与态间SOC联合分析

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：能隙及SOC通道比较

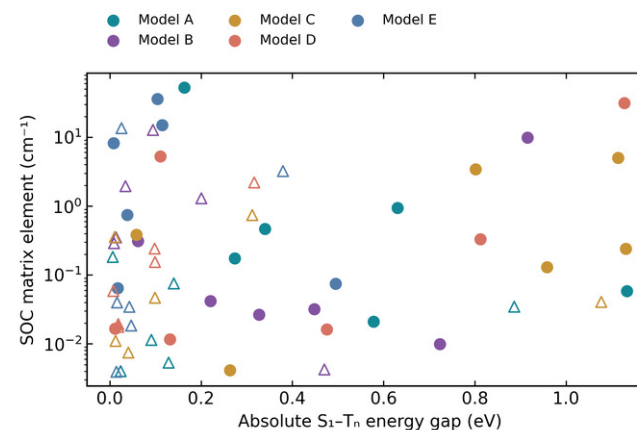
Nat. Commun. 2018, 9, 3044. Fig. 3c-e

DOI: 10.1038/s41467-018-05476-y

图024 示例数据

能隙与自旋轨道耦合

态间能隙 · 自旋耦合 · 多态比较



Illustrative data

联合展示单重态与三重态之间的能隙和自旋轨道耦合，辨认**能量接近且耦合较强的候选态对**。不同颜色与符号组织体系及模型差异，可与激发态性质、NTO和跃迁速率分析配合，讨论分子结构或环境变化对系间窜越通道的影响。

独立示例数据。

应用参考：能级与态间SOC联合分析

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：能隙及SOC通道比较

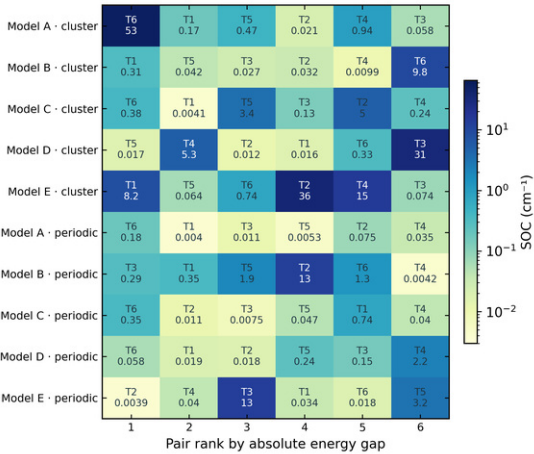
Nat. Commun. 2018, 9, 3044. Fig. 3c-e

DOI: 10.1038/s41467-018-05476-y

图182 示例数据

态对SOC能隙排序矩阵

自旋耦合 · 态对排序 · 对数色阶



Illustrative data

在每个体系内部按能隙排列态对，以矩阵色阶同时显示其自旋轨道耦合强弱，并保留原态标签。可直观比较**近共振态对与显著耦合的位置**，适用于不同模型的并列分析，并与能隙散点和通道结果互补。

独立示例数据。

应用参考：能级与态间SOC联合分析

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：能隙及SOC通道比较

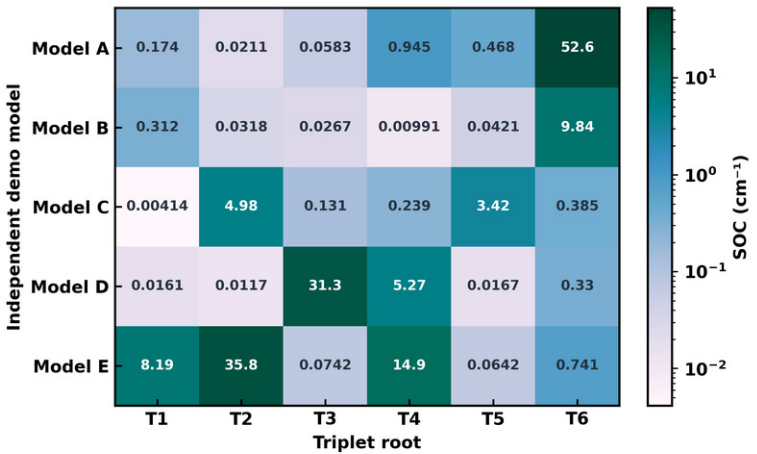
Nat. Commun. 2018, 9, 3044. Fig. 3c-e

DOI: 10.1038/s41467-018-05476-y

图138 示例数据

自旋轨道耦合通道矩阵

态间耦合 · 通道矩阵 · 对数色阶



Illustrative data

按体系与电子态编号排列自旋轨道耦合，将选定态对放入矩阵，突出**强耦合通道与不同体系的分布差异**。适合与能隙散点互补浏览，并结合电子态组成和振动耦合信息，清楚定位需要重点讨论的系间窜越通道。

独立示例数据

应用参考：能级与态间SOC联合分析

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 3b

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：能隙及SOC通道比较

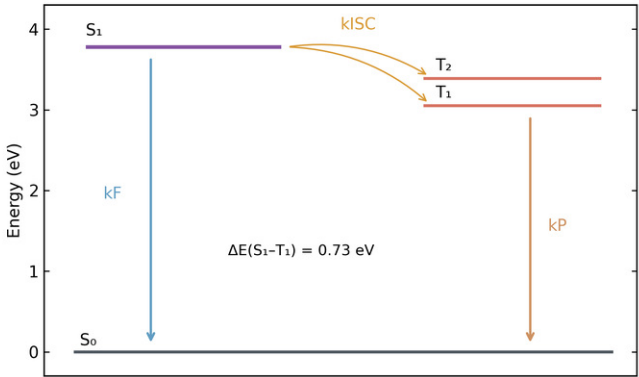
Nat. Commun. 2018, 9, 3044. Fig. 3c-e

DOI: 10.1038/s41467-018-05476-y

图106 示例数据

系间窜越与辐射跃迁

系间窜越 · 荧光 · 磷光



Illustrative data

通过能级线和方向箭头组织激发态之间的转换，将系间窜越、荧光与磷光通道清楚对应到相关电子态。适合解释发光机制与竞争过程，并结合能隙、自旋轨道耦合和速率数据，建立从电子态到发射性质的分析框架。

独立示例数据。

画法参考：简化Jablonski通道示意

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 6d

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：ISC/RISC/IC及辐射通道

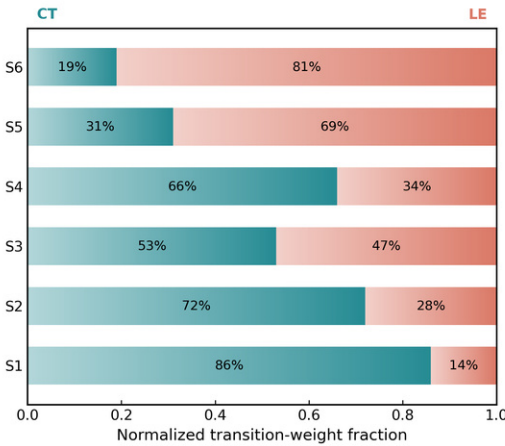
Nat. Commun. 2024, 15, 2267. Fig. 2

DOI: 10.1038/s41467-024-46406-5

图071 示例数据

激发态CT与LE组分

电荷转移 · 局域激发 · 组分对照



Illustrative data

以归一化堆叠条展示不同激发态的电荷转移与局域激发组分，使各态的电子性质及组分变化易于比较。可结合激发能、自然跃迁轨道和片段跃迁权重，讨论结构或环境对激发态性质的调控，帮助建立电子态身份与吸收、发光行为之间的联系。

独立示例数据

应用参考：片段CT数及激发态性质

Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202205198. Fig. 5D-F

DOI: 10.1002/anie.202205198

应用参考：CT与局域激发的NTO判断

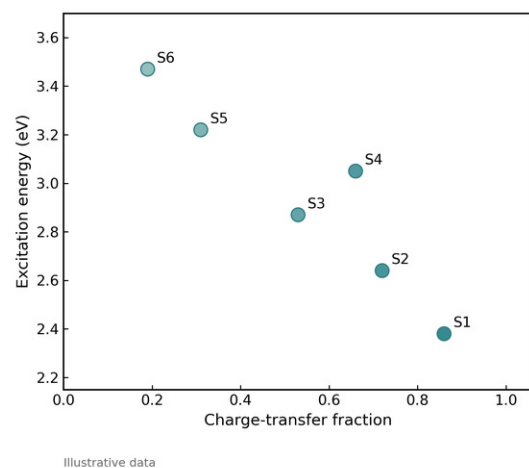
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202415056. Fig. 7b,c

DOI: 10.1002/anie.202415056

图177 示例数据

激发能与电荷转移组分

激发能 · 电荷转移 · 态性质



将激发态能量与电荷转移组分联系在同一散点图中，直观比较**不同态的能量位置与转移特征**。适用于整理激发态归属和候选态筛选，可与局域激发组分、跃迁密度及轨道分析对应，帮助理解结构变化引起的光物理差异。

独立示例数据

应用参考：片段CT数及激发态性质

Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202205198. Fig. 5D-F

DOI: [10.1002/anie.202205198](https://doi.org/10.1002/anie.202205198)

应用参考：CT与局域激发的NTO判断

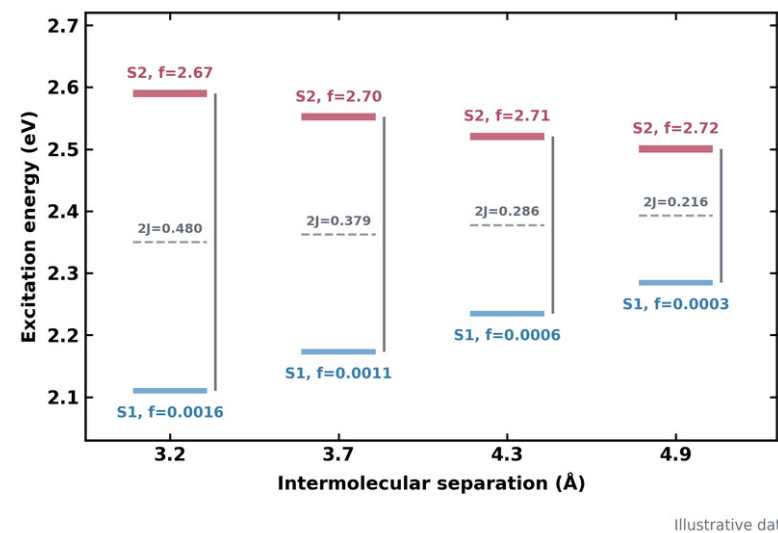
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202415056. Fig. 7b,c

DOI: [10.1002/anie.202415056](https://doi.org/10.1002/anie.202415056)

图118 示例数据

距离依赖激发态分裂

激子耦合 · 距离响应 · 能级分裂



按分子间距离排列激发态能级和分裂信息，并对应显示跃迁强度变化，突出**空间距离、态间相互作用与光学响应的关联**。适合分析聚集体或二聚体中的激子耦合，并与代表构型、跃迁偶极和吸收光谱配合解释距离效应。

独立示例数据

应用参考：分子排列与间距影响激子能级和耦合

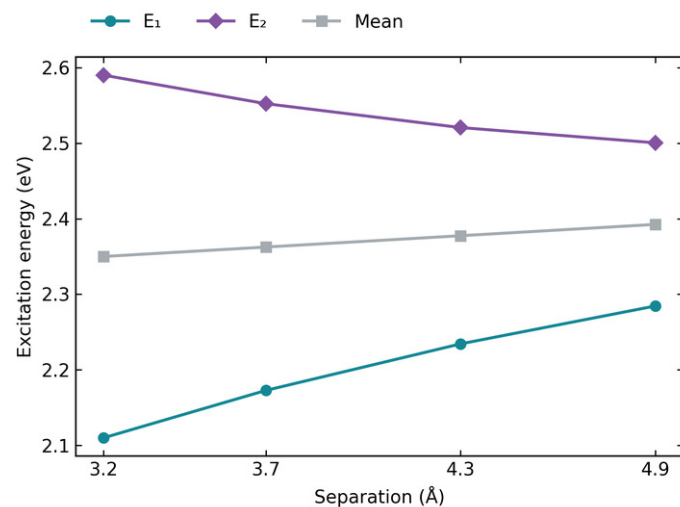
Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202116834. Fig. 6F; Fig. 7

DOI: [10.1002/anie.202116834](https://doi.org/10.1002/anie.202116834)

图183 示例数据

激子双支能级与分子间距

激子耦合 · 能级分支 · 距离变化



Illustrative data

以距离为横轴展示双支激发能和平均能量，直观观察**能级分离及其随间距变化的趋势**。适用于组织双能级模型或聚集体比较，可与能级劈裂和耦合参数表达互补，说明相互作用距离对激发态能量结构的影响。

独立示例数据。

应用参考：分子排列与间距影响激子能级和耦合

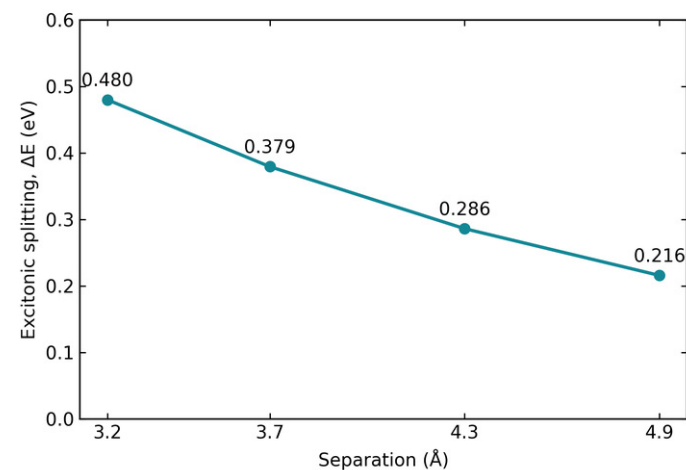
Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202116834. Fig. 6F; Fig. 7

DOI: [10.1002/anie.202116834](https://doi.org/10.1002/anie.202116834)

图073 示例数据

激子能级劈裂与分子间距

激子耦合 · 能级劈裂 · 距离依赖



Illustrative data

沿分子间距展示双能级模型中的激子能级劈裂，突出**相互靠近或分离时耦合强度的变化**。统一能量与距离坐标便于比较不同排列，可与两支激发能、聚集结构和吸收光谱共同阅读，用于组织分子堆积如何关联激子相互作用的讨论。

独立示例数据。

应用参考：分子排列与间距影响激子能级和耦合

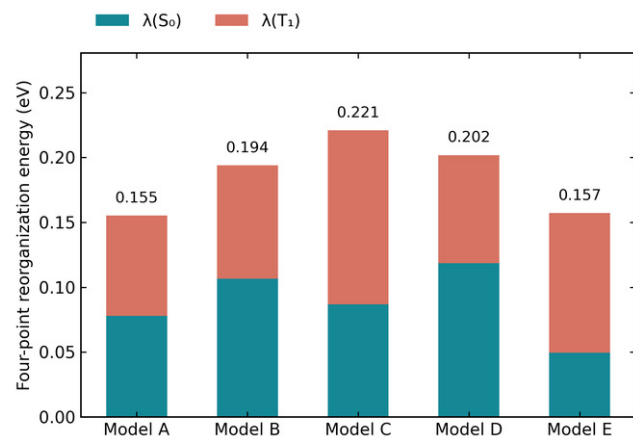
Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202116834. Fig. 6F; Fig. 7

DOI: [10.1002/anie.202116834](https://doi.org/10.1002/anie.202116834)

图125 示例数据

四点法重组能分量

四点法 · 重组能 · 分量堆叠



Illustrative data

本卡含 2 个展示版本；原编号：图125、图163。

以**垂直堆积柱**比较各个体系的两项几何弛豫贡献，总柱高对应四点法重组能。不同颜色分别表示基态和三重态势能面上的弛豫项，适合区分总量变化与组分变化，并与相关构型和能量关系对应。

 S_0-T_1 四点法的独立示例分量。

画法参考：色块分量堆叠构成总柱

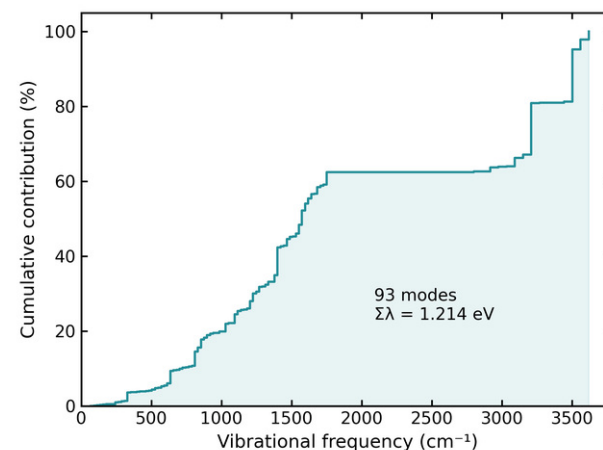
Nat. Commun. 2020, 11, 4472. Fig. 4a

DOI: 10.1038/s41467-020-18227-9

图072 示例数据

逐模重组能累计贡献

模式贡献 · 振动耦合



Illustrative data

结合**频率**、**黄昆因子**与**逐模重组能**观察振动耦合的分布。棒谱、累计贡献、排名与散点使用同一组模式数据，分别显示高贡献频段、主要模式及耦合强度与能量贡献的关系。

Illustrative data

应用参考：逐模重组能随频率分布

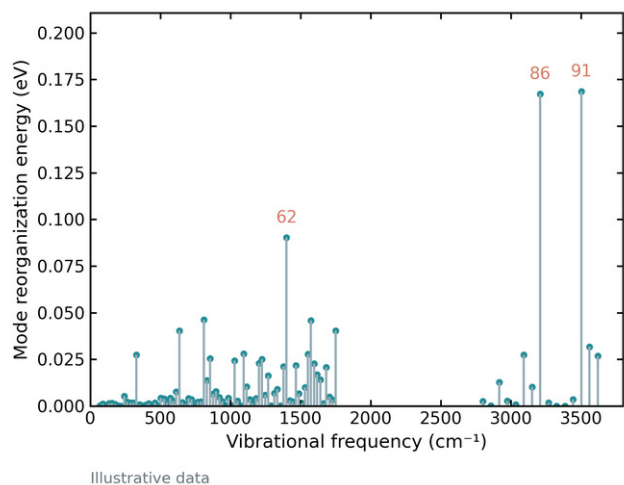
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 4a,b

DOI: 10.1002/anie.202511678

图165 示例数据

逐模重组能频率棒谱

模式贡献 · 振动耦合



结合**频率**、**黄昆因子**与**逐模重组能**观察振动耦合的分布。棒谱、累计贡献、排名与散点使用同一组模式数据，分别显示高贡献频段、主要模式及耦合强度与能量贡献的关系。

Illustrative data

应用参考：逐模重组能随频率分布

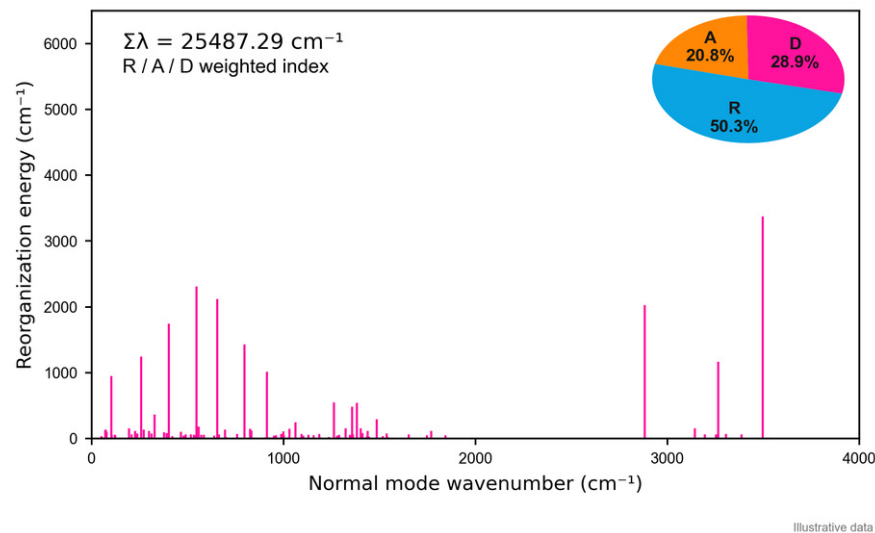
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 4a,b

DOI: 10.1002/anie.202511678

图119 示例数据

逐模重组能与坐标权重

重组能 · 模式贡献 · 坐标权重



结合逐模棒谱与组成图展示重组能的频率分布及内坐标权重，突出**主导模式与伸缩、弯曲、扭转特征的联系**。适合梳理电子态变化引起的核结构调整，并与模式位移和黄昆因子对应，帮助辨认影响光物理过程的局部变形。

独立示例数据

应用参考：振动频率与内坐标重组能贡献

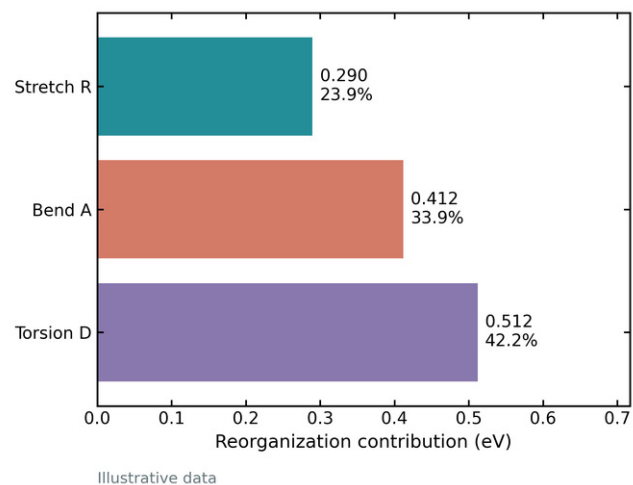
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 4a,b及插图

DOI: 10.1002/anie.202511678

图166 示例数据

内坐标重组能贡献

示例数据 · 性质比较



按**伸缩、弯曲与扭转内坐标**汇总重组能贡献。横柱或环形占比同时呈现绝对能量及相对份额，适合观察几何弛豫的主要组成，并与逐模贡献和结构变化配合讨论。

Illustrative data

应用参考：振动频率与内坐标重组能贡献

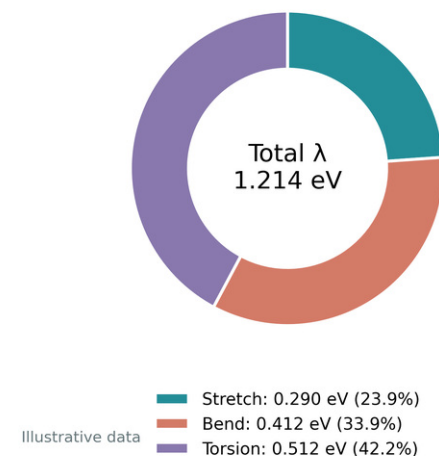
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 4a,b及插图

DOI: 10.1002/anie.202511678

图282 示例数据

内坐标重组能组分

示例数据 · 性质比较



按**伸缩、弯曲与扭转内坐标**汇总重组能贡献。横柱或环形占比同时呈现绝对能量及相对份额，适合观察几何弛豫的主要组成，并与逐模贡献和结构变化配合讨论。

Illustrative data

应用参考：振动频率与内坐标重组能贡献

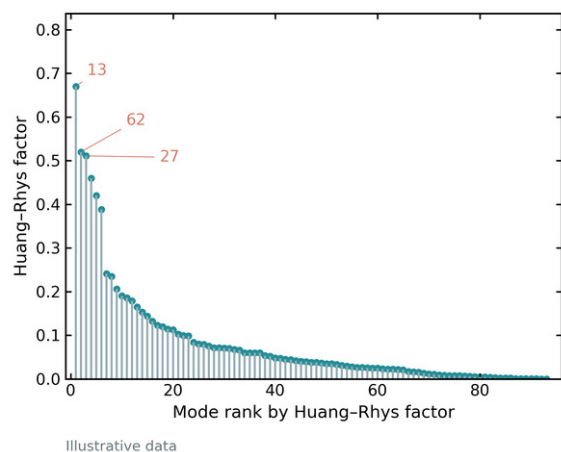
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 4a,b及插图

DOI: 10.1002/anie.202511678

图170 示例数据

黄昆因子模式排名

模式排名 · 黄昆因子 · 贡献比较



将振动模式按黄昆因子从高到低排序，用棒线与端点突出**主导模式及耦合强度的长尾分布**。横轴为模式排名，模式编号用于定位重点项，可与频率棒谱和重组能累计图配合分析。

Illustrative data

应用参考：逐模HR及重组能分布

Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 3a,b; Fig. 4a,b

DOI: 10.1002/anie.202511678

应用参考：HR因子随振动频率比较

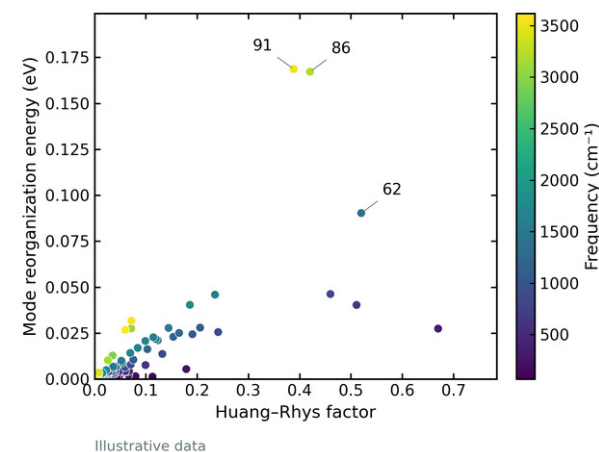
Nat. Commun. 2026, 17, 678. Fig. 1d-f

DOI: 10.1038/s41467-025-67342-y

图003 示例数据

黄昆因子与逐模重组能

模式贡献 · 振动耦合



结合**频率、黄昆因子与逐模重组能**观察振动耦合的分布。棒谱、累计贡献、排名与散点使用同一组模式数据，分别显示高贡献频段、主要模式及耦合强度与能量贡献的关系。

Illustrative data

应用参考：逐模HR及重组能分布

Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 3a,b; Fig. 4a,b

DOI: 10.1002/anie.202511678

应用参考：HR因子随振动频率比较

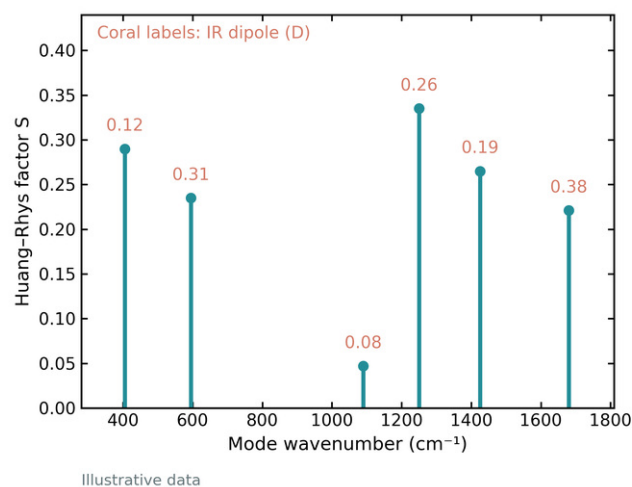
Nat. Commun. 2026, 17, 678. Fig. 1d-f

DOI: 10.1038/s41467-025-67342-y

图278 示例数据

S1振动耦合与非零IR偶极示例

示例数据 · 性质比较



在同一频率坐标下显示**黄昆因子与IR偶极标注**，观察振动耦合强度及不同模式的偶极响应。棒高与数字分别使用无量纲和Debye单位，适合比较模式的两种性质。

Illustrative data

画法参考：按振动频率排列模式棒谱

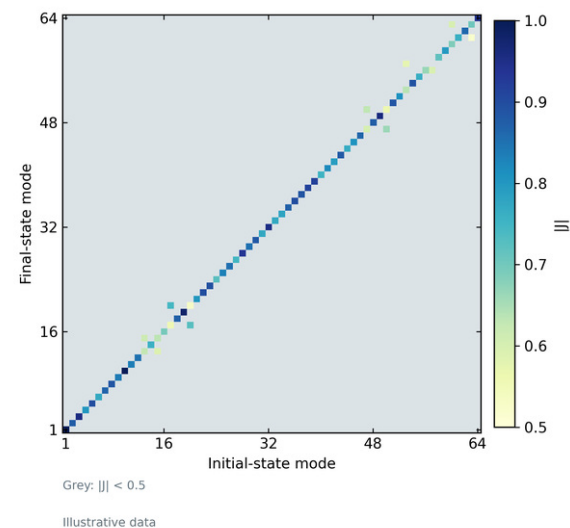
Nat. Commun. 2026, 17, 678. Fig. 1d-f

DOI: 10.1038/s41467-025-67342-y

图109 示例数据

Duschinsky模式混合幅值

模式混合 · 幅值矩阵 · 振动耦合



用矩阵颜色展示初末态振动模式之间的混合幅值，突出**对角对应与离对角耦合区域**。适合观察模式重排和局部混合，帮助组织振动分辨光谱分析，并与频率变化、几何位移及黄昆因子配合，解释不同电子态之间的振动联系。

色阶0.5–1；灰色为低于0.5的幅值。

画法参考：Duschinsky模式混合矩阵

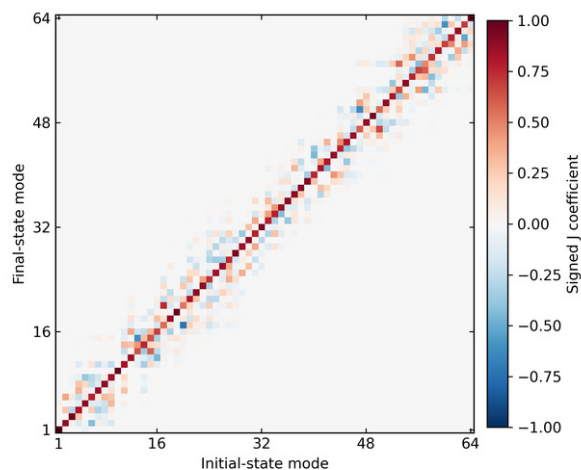
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 5a,b

DOI: 10.1002/anie.202511678

图124 示例数据

有符号振动模式混合矩阵

模式混合 · 有符号 · 振动耦合



Illustrative data

以双向色阶展示初末态振动模式变换矩阵，保留系数符号并突出**模式对应、相位关系与离对角混合**。适合检查振动模式重排和耦合范围，与频率、几何位移及光谱结果配合，说明电子态变化如何影响核振动的组织方式。

独立示例数据。

画法参考：Duschinsky模式混合矩阵

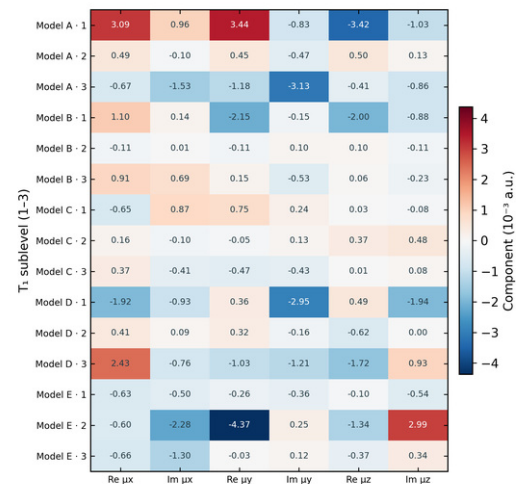
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 5a,b

DOI: 10.1002/anie.202511678

图184 示例数据

复跃迁偶极分量矩阵

跃迁偶极 · 实虚分量 · 有符号



Illustrative data

将复跃迁偶极的各坐标实部与虚部分列成矩阵，以零为中心的色阶保留正负号，方便逐态查阅**分量尺度、符号与主要贡献**。适用于对照模型和自旋子能级的数值结果，并可与复平面散点及原始分量表相互核对。

独立示例数据。

画法参考：以矩阵色阶比较各项数值

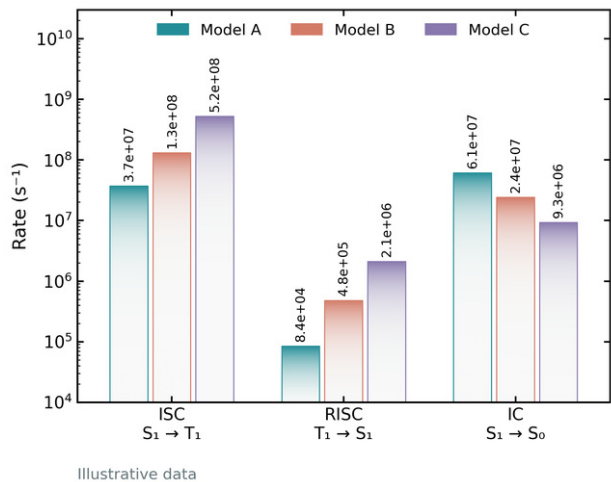
Angew. Chem. Int. Ed. 2025, 64, e202511678. Fig. 5a,b

DOI: 10.1002/anie.202511678

图025 示例数据

ISC、RISC与IC速率比较

光物理 · 三组柱图



以ISC、RISC和IC三个通道比较不同模型的速率。三系列并列渐变柱与通道轮廓共用独立示例数据，对数坐标容纳跨数量级差异，系列颜色帮助追踪同一模型。

Illustrative data

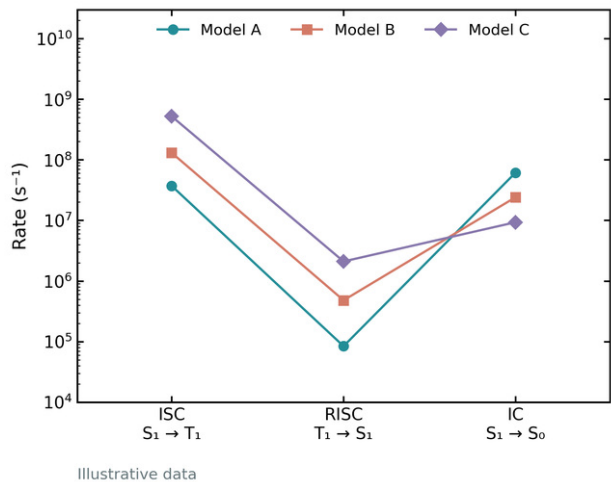
应用参考：ISC、RISC与IC速率通道
Nat. Commun. 2024, 15, 2267. Fig. 2
DOI: 10.1038/s41467-024-46406-5

应用参考：比较ISC/RISC速率
Nature 2022, 609, 502-506. Extended Data Fig. 3a,b
DOI: 10.1038/s41586-022-05132-y

图169 示例数据

光物理通道速率轮廓

光物理 · 通道轮廓 · 速率比较



将ISC、RISC与IC通道速率依次连接，在对数纵轴上比较数量级差异与通道轮廓。系列颜色帮助追踪同一模型，可与同源并列柱图配合，观察不同弛豫通道的相对强弱。

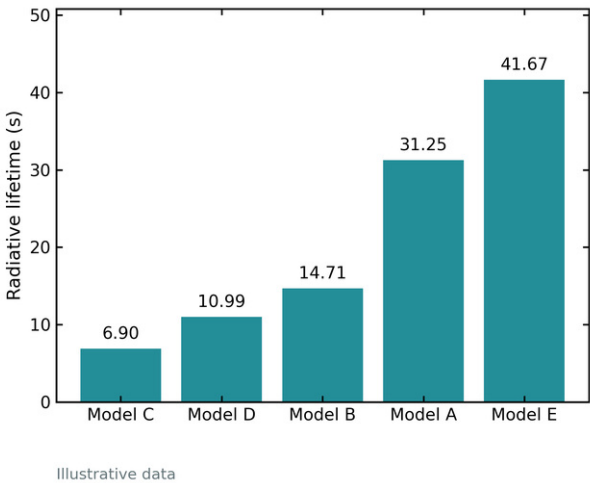
Illustrative data

应用参考：ISC、RISC与IC速率通道
Nat. Commun. 2024, 15, 2267. Fig. 2
DOI: 10.1038/s41467-024-46406-5
应用参考：比较ISC/RISC速率
Nature 2022, 609, 502-506. Extended Data Fig. 3a,b
DOI: 10.1038/s41586-022-05132-y

图167示例数据

磷光辐射寿命比较

示例数据 · 性质比较



用**辐射速率的倒数**比较模型的辐射寿命。排序柱图便于观察高低与差距，保留统一秒单位；该量用于讨论辐射通道变化，需要结合其他衰减通道解释总体发光行为。

Illustrative data

画法参考：不同体系寿命的并列柱比较

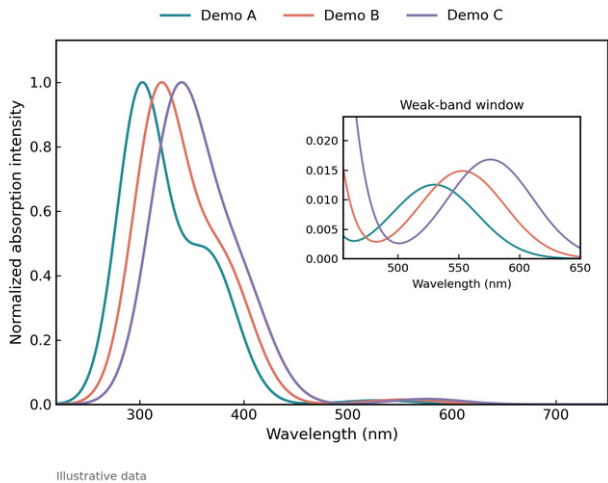
Nat. Commun. 2026, 17, 4858. Fig. 4b

DOI: 10.1038/s41467-026-71445-5

图027示例数据

吸收光谱与弱带放大

电子吸收 · 弱带放大 · 全谱比较



本卡含 2 个展示版本；原编号：图027、图148。

在完整吸收谱中加入弱带辅助视窗，同时呈现**主吸收峰与低强度谱带的细节**。主图与视窗使用同一归一化，便于观察峰位、相对强度和谱带分布，可与电子跃迁、振子强度及轨道分析配合，用于解释分子修饰或环境变化对吸收特征的影响。

独立示例数据

画法参考：完整吸收谱与弱特征局部视窗

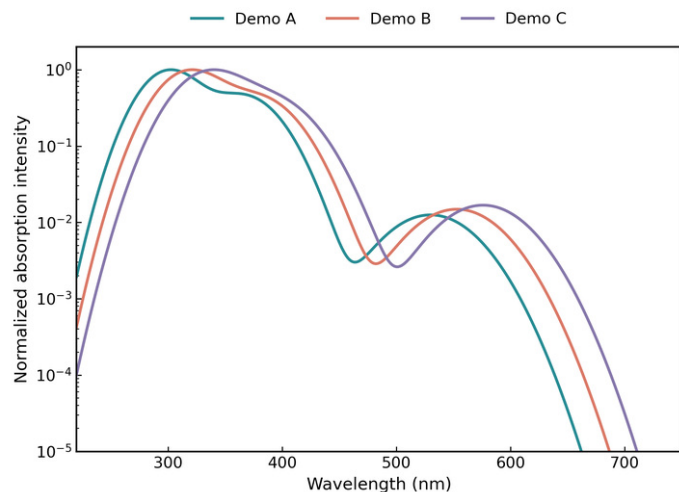
Nat. Commun. 2017, 8, 29. Fig. 4及插图

DOI: 10.1038/s41467-017-00069-7

图159 示例数据

吸收全谱对数强度

吸收光谱 · 对数强度 · 弱谱带



Illustrative data

在同一全谱范围使用对数强度坐标展开弱带和谱尾，使**跨数量级的光谱特征**与主峰同时可见。适用于查看微弱吸收区域及谱带延伸，并可与线性强度表达互补，比较分子修饰或环境改变对吸收范围和相对谱形的影响。

独立示例数据

画法参考：同时保留主吸收谱与弱特征

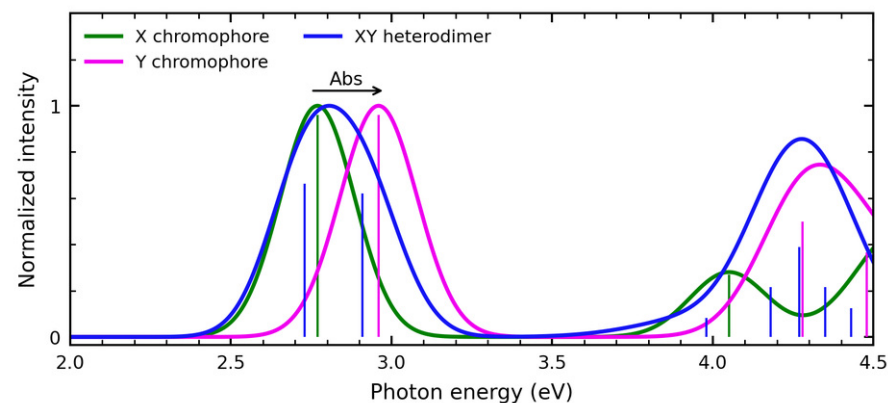
Nat. Commun. 2017, 8, 29. Fig. 4及插图

DOI: 10.1038/s41467-017-00069-7

图110 示例数据

吸收展宽谱与跃迁棒线

吸收光谱 · 跃迁棒线 · 谱峰展宽



Illustrative data

将离散电子跃迁棒线与展宽后的吸收包络叠放，直观对应**跃迁位置、相对权重与连续谱带**。适合比较不同体系的吸收范围、主要峰位和弱带贡献，并结合激发态组成与轨道分析，解释谱形变化及电子结构的关联。

独立示例数据

画法参考：离散棒谱与连续展宽包络

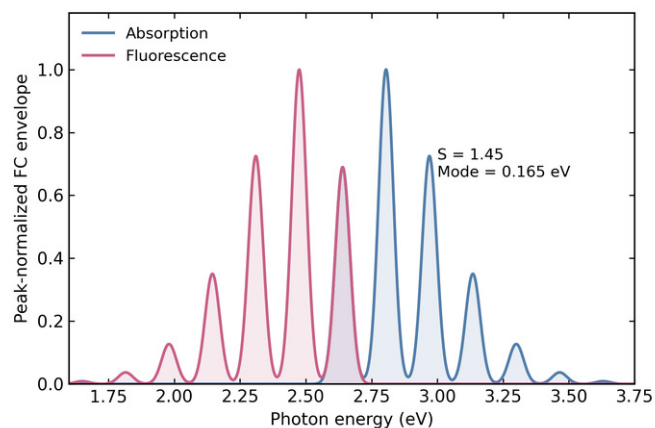
Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202319702. Fig. 1

DOI: 10.1002/anie.202319702

图187 示例数据

吸收与荧光振动叠谱

吸收荧光 · 振动进程 · 同轴叠谱



Illustrative data

在统一能量坐标中叠绘吸收与荧光振动包络，以互补配色和适量填色辨认**峰位对应、谱形差异与振动进程**。适用于展示同一模型的光谱关系，可与棒谱及镜像表达互补，分析振动耦合参数对吸收和发射特征的影响。

独立示例数据。

应用参考：共同坐标比较吸收/发射

Nat. Commun. 2019, 10, 1049. Fig. 1c

DOI: [10.1038/s41467-019-08611-5](https://doi.org/10.1038/s41467-019-08611-5)

画法参考：振动进程、棒谱与包络

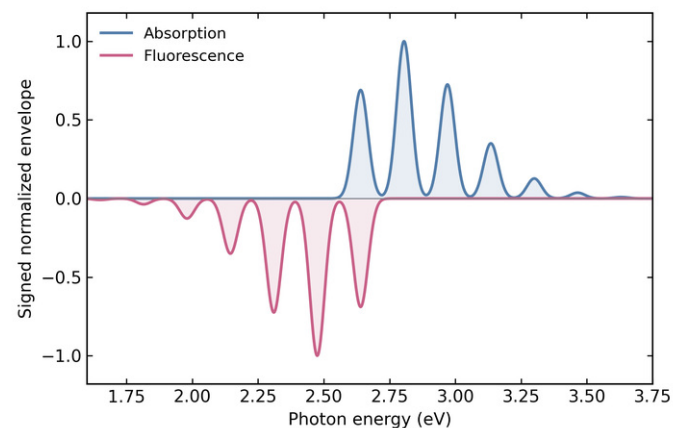
Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202319702. Fig. 1

DOI: [10.1002/anie.202319702](https://doi.org/10.1002/anie.202319702)

图026 示例数据

吸收与荧光镜像光谱

振动分辨 · 镜像光谱 · 吸收荧光



Illustrative data

将吸收与荧光以镜像形式放在共同光子能量轴上，突出**谱峰位置、振动进程与吸收发射之间的对应**。统一归一化便于比较谱形和能量偏移，可与黄昆因子、重组能和模式贡献配合，用于说明电子与振动耦合如何影响分子吸收、发射及斯托克斯位移。

独立示例数据。

应用参考：共同坐标比较吸收/发射

Nat. Commun. 2019, 10, 1049. Fig. 1c

DOI: [10.1038/s41467-019-08611-5](https://doi.org/10.1038/s41467-019-08611-5)

画法参考：振动进程、棒谱与包络

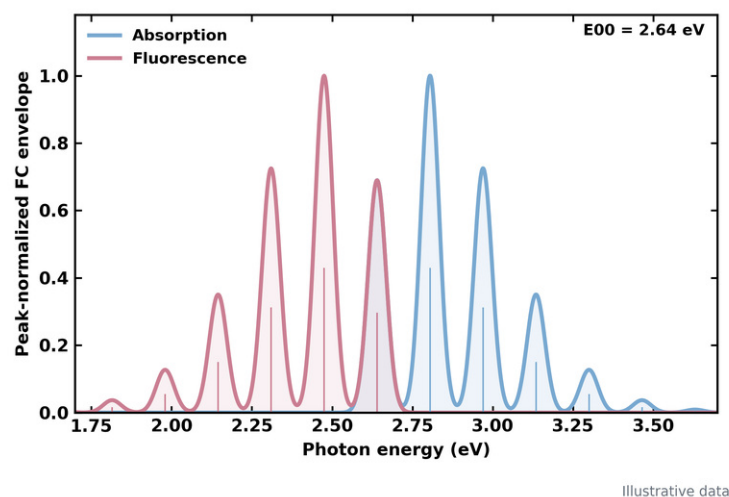
Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202319702. Fig. 1

DOI: [10.1002/anie.202319702](https://doi.org/10.1002/anie.202319702)

图150 示例数据

振动分辨吸收与荧光

振动进程 · 吸收荧光 · 棒谱包络



以同轴曲线展示吸收与荧光的振动分辨包络，使**峰位、峰间距与相对强度分布**清楚对应。可用于理解单模振动耦合对谱形的影响，比较模型参数变化带来的包络差异，并为实验光谱的振动特征提供表达参考。

独立示例数据

应用参考：共同坐标比较吸收/发射

Nat. Commun. 2019, 10, 1049. Fig. 1c

DOI: [10.1038/s41467-019-08611-5](https://doi.org/10.1038/s41467-019-08611-5)

画法参考：振动进程、棒谱与包络

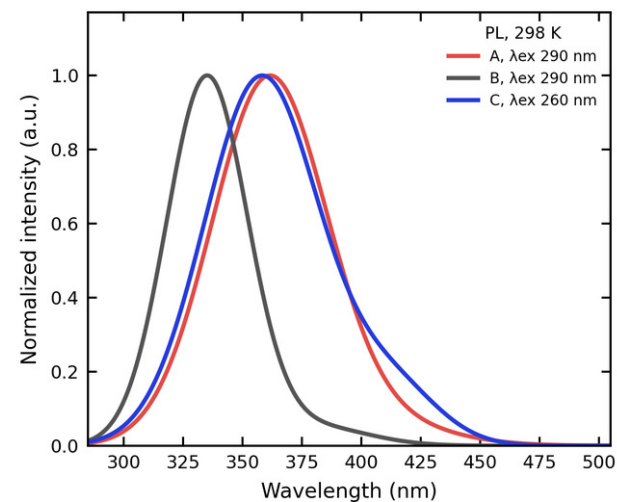
Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, e202319702. Fig. 1

DOI: [10.1002/anie.202319702](https://doi.org/10.1002/anie.202319702)

图112 示例数据

不同体系光致发光光谱

光致发光 · 峰位对比 · 归一化谱



叠绘不同体系的光致发光谱，以分类颜色区分谱线，比较**发射峰位、谱带宽度与谱形特征**。适合筛选发光材料或分析分子修饰的光学响应，并与激发态能量、构象及电子结构结合，建立结构变化与发射性质之间的联系。

独立示例数据

应用参考：比较不同环境的计算发射谱

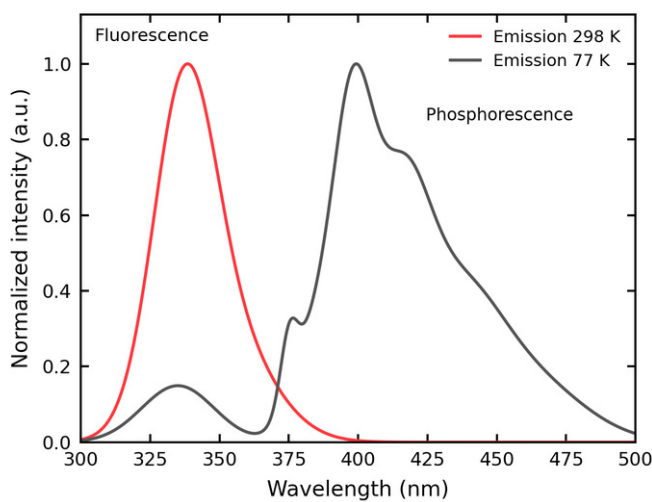
Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202205198. Fig. 5A

DOI: [10.1002/anie.202205198](https://doi.org/10.1002/anie.202205198)

图111 示例数据

温度条件下的发射光谱

温度响应 · 发射光谱 · 谱形对比



Illustrative data

在统一波长坐标下对照不同温度条件的发射谱，突出**峰位变化、谱带展宽与发射组分差异**。适合讨论热激活过程、构象响应及发光通道的变化，并与寿命和速率结果配合，组织温度依赖光物理性质的比较。

独立示例数据

画法参考：温度序列发射谱

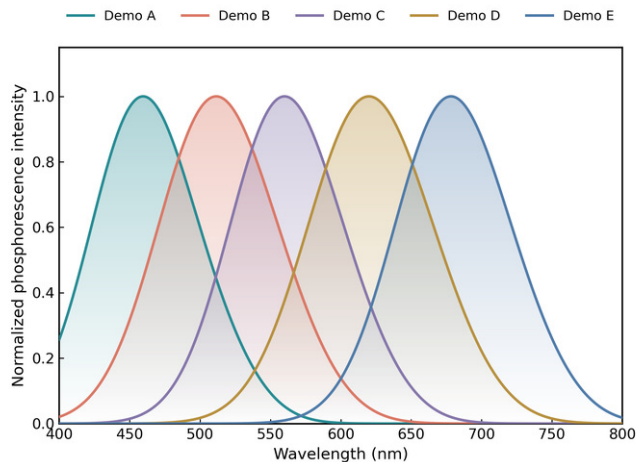
Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 6a-c

DOI: 10.1002/anie.202309718

图004 示例数据

磷光光谱

磷光 · 光谱对比 · 渐变填色



Illustrative data

在统一波长坐标下比较不同体系的**磷光峰位、带宽与谱形差异**，直观呈现发射波段的移动和光谱重叠。曲线下方采用同色渐变填充，保留清楚的谱线轮廓，适合展示取代基、构象或环境变化对应的发光特征。

独立示例数据

应用参考：比较磷光峰位和谱形

Angew. Chem. Int. Ed. 2023, 62, e202309718. Fig. 5a; Fig. 6a-c

DOI: 10.1002/anie.202309718

应用参考：延迟PL光谱比较

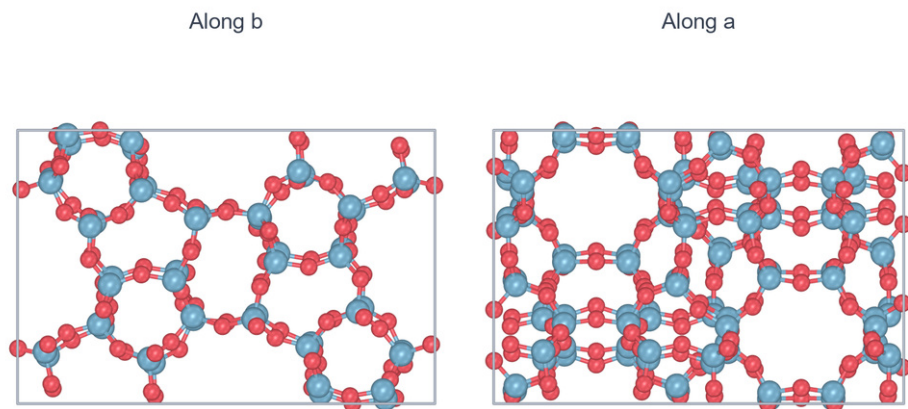
Nat. Commun. 2026, 17, 4858. Fig. 4a,f

DOI: 10.1038/s41467-026-71445-5

图029 公开理想骨架结构

MFI多孔框架结构

结构·球棍



本卡含 3 个展示版本；原编号：图029、图079、图214。

通过不同方向的晶胞投影呈现**孔道窗口、骨架连接与周期排列**，便于比较孔隙尺度及空间连通关系。示例以理想全硅分子筛为结构载体，展示相同骨架在两种观察方向下的差异，可用于孔道设计、客体容纳空间及结构模型的直观说明。

公开理想骨架结构

应用参考：UiO-66局部节点与周期框架

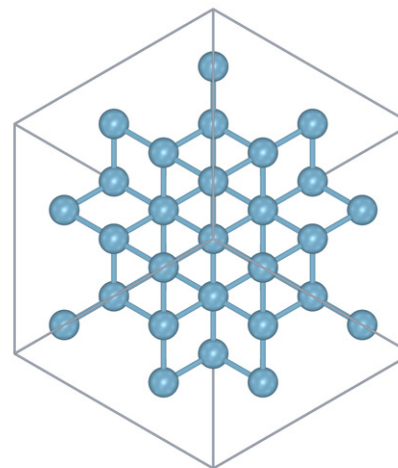
Nat. Commun. 2025, 16, 2447. Fig. 4a,b

DOI: 10.1038/s41467-025-57816-4

图075 独立理想晶体模型

硅晶胞与周期结构

结构·球棍



本卡含 3 个展示版本；原编号：图075、图211、图212。

采用晶胞边界和球棍表示呈现**原子排列、近邻连接及周期重复**，便于检查结构模型的空间关系。可用于晶体结构介绍、超胞构建和不同晶型对比；观察方向应兼顾三维深度与原子遮挡，使主要配位环境清晰可辨。

独立理想晶体模型

应用参考：主客体共晶的晶体结构

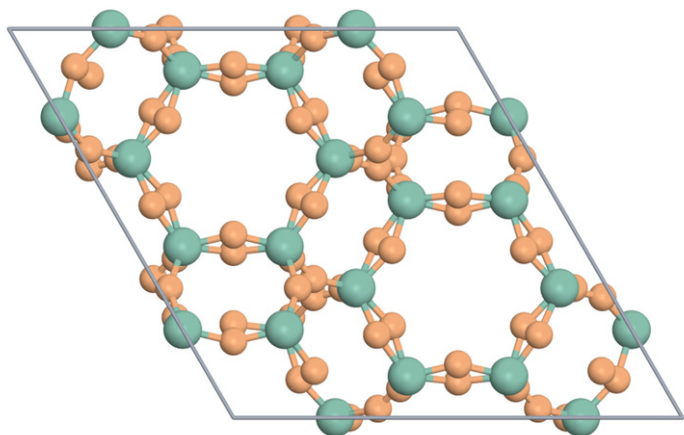
Nat. Commun. 2024, 15, 1425. Fig. 3a

DOI: 10.1038/s41467-024-45717-x

图213 公开理想骨架结构

柔和配色多孔骨架结构

结构·球棍



以柔和元素色呈现多孔框架的连接关系和晶胞边界，突出**空腔、窗口与三维重复结构**。适合展示不同拓扑中的空间组织，也可为孔内客体位置或结构变化提供直观背景。

公开理想骨架结构

画法参考：元素分色多孔框架球棍

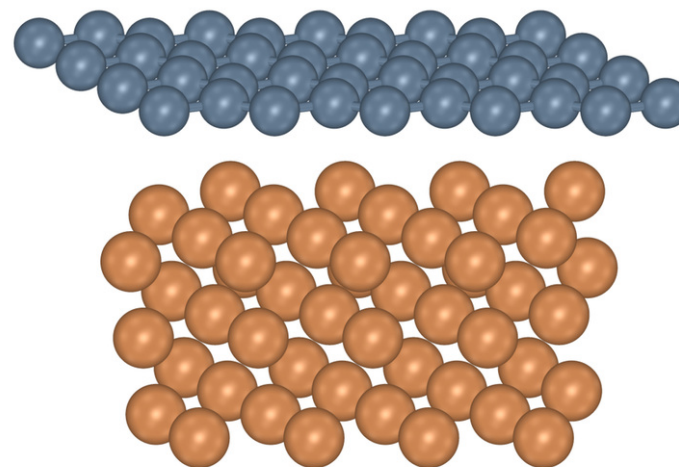
Nature 2019, 576, 253-256. Fig. 3a,b

DOI: 10.1038/s41586-019-1798-7

图030 独立建模

异质界面原子结构

结构·球棍



以元素分色和侧向视角区分片层与金属基底，突出**界面间距、层次关系与表面接触区域**。适合展示异质结构的模型组成和界面几何，并与后续电子性质或吸附分析建立对应。示例为独立建立的未优化几何模型。

独立初始几何模型

应用参考：异质界面的原子模型与电子重排

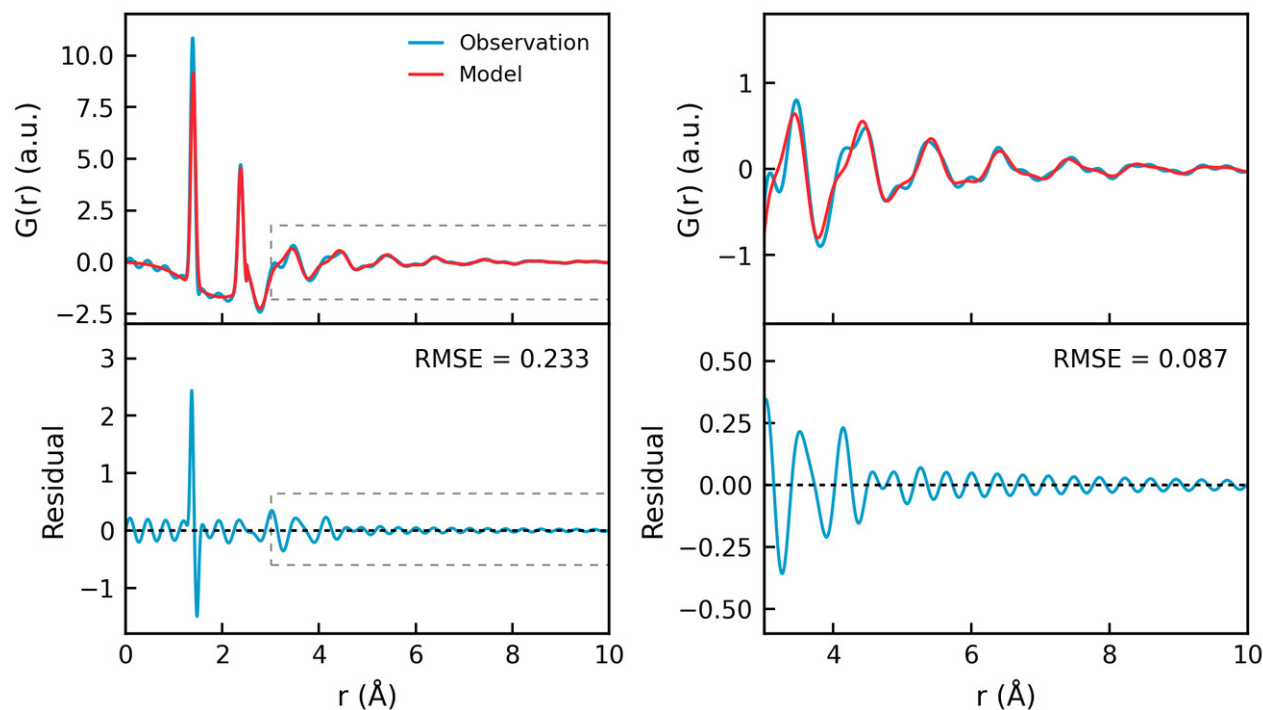
Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 4c

DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

图188 示例数据

原子对分布与拟合残差

原子分布 · 结构拟合 · 残差分析



Illustrative data

以原子对分布曲线对照观测轮廓与结构模型，并在独立区域展示**拟合残差及局部细节**。整体与放大视图采用对应的距离范围，便于识别模型在不同距离尺度的偏差，可用于比较局域有序性、配位结构及结构模型的解释能力。

Illustrative data

画法参考：原子对分布实验曲线与结构拟合

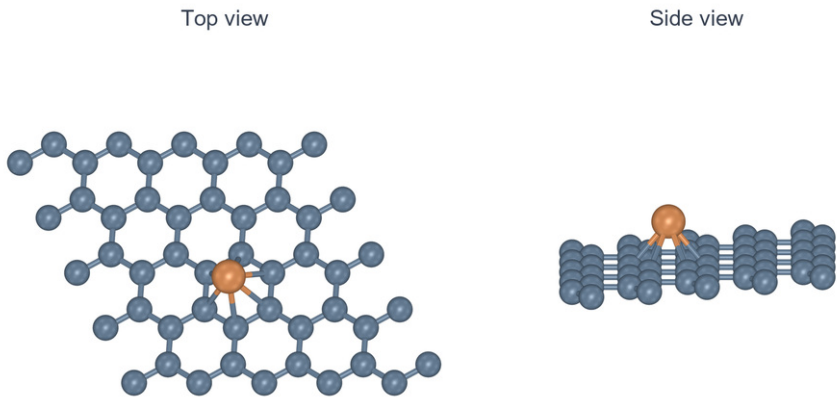
Nat. Mater. 2023, 22, 311-315. Fig. 1c; Fig. 2a,b

DOI: 10.1038/s41563-023-01483-7

图077 独立建模

金属位点局部几何结构

结构 · 球棍



通过俯视与侧视共同展示金属位点和周围骨架的空间关系，突出**位点位置、邻近原子及离面高度**。适合比较不同支撑环境和候选吸附位置，为后续配位、电荷转移或稳定性分析提供几何背景。示例为独立未优化模型。

独立初始几何模型

画法参考：金属位点局部配位几何

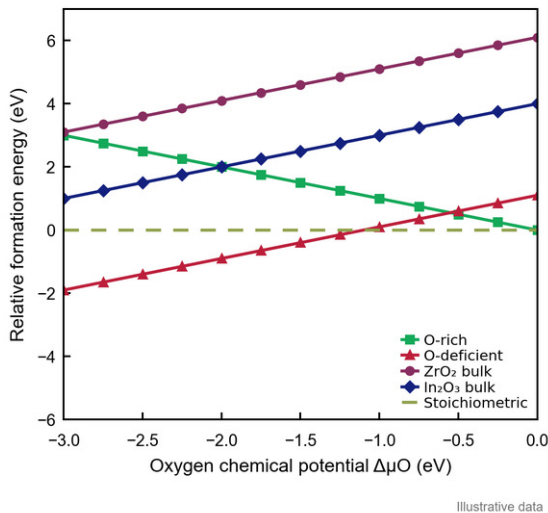
Nat. Commun. 2023, 14, 4766. Fig. 3i

DOI: 10.1038/s41467-023-40467-8

图032 示例数据

形成能与化学势关系

形成能 · 化学势 · 稳定性



沿化学势变化比较不同结构或组分的相对形成能，直观展示**环境条件如何改变稳定性排序**。不同分支的交叉区间可用于讨论候选构型的竞争关系，零能量参照便于辨认相对有利与不利的区域，适合缺陷、表面终止和非化学计量结构研究。

Illustrative data

应用参考：氧空位形成能随氧化化学势变化

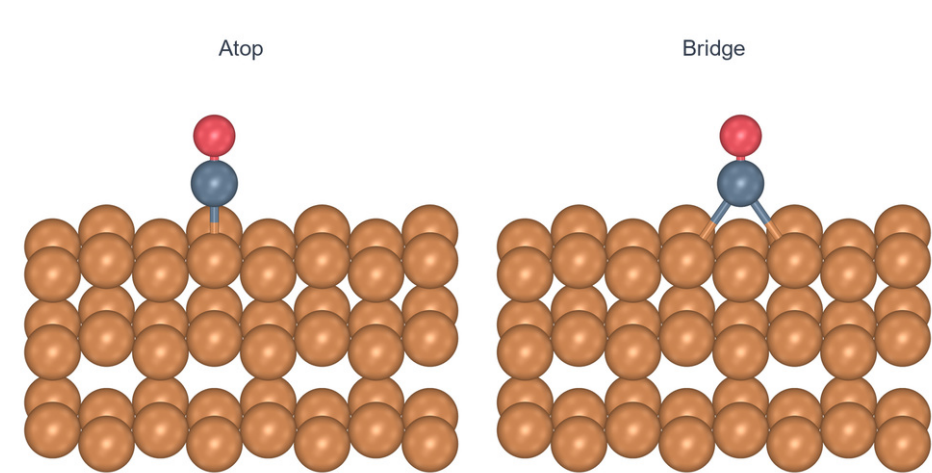
Nat. Commun. 2016, 7, 11892. Fig. 8a

DOI: 10.1038/ncomms11892

图076 独立建模

不同吸附候选构型对照

结构 · 球棍



以相同视角和尺度并列展示不同表面位点的吸附候选，突出**吸附位置、分子取向和局部接触几何**。适合说明结构搜索的候选范围，以及几何变化与后续能量比较的对应关系。示例为未优化的CO/Cu(111)初始模型。

独立初始几何模型

应用参考：修饰前后O2吸附构型

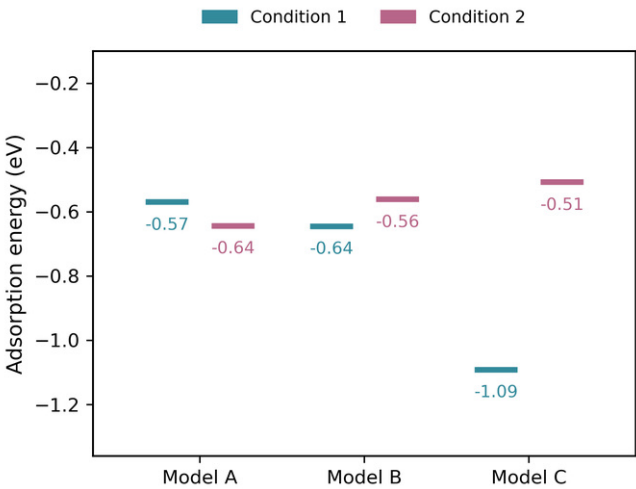
Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 5a

DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

图084 示例数据

吸附能：三体系双条件离散能级

吸附能 · 双条件 · 多体系



Illustrative data

比较不同体系在两种条件下的**吸附能与条件响应**，统一能量定义和单位，使绝对量级、排序及同体系变化清楚对应。同组图共用独立生成的数值，可按对比重点选择柱状或离散能级表达。

Illustrative data

应用参考：位点修饰前后吸附能比较

Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 5b

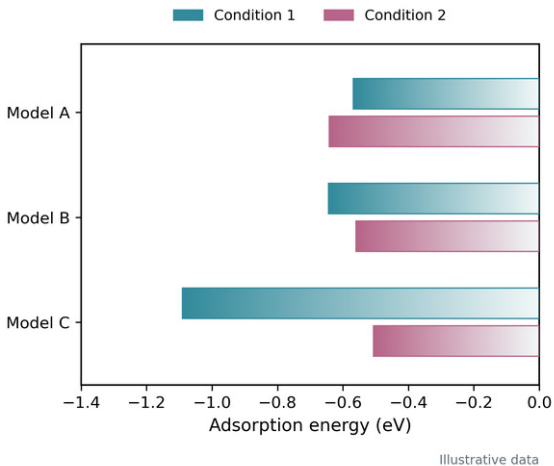
DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

吸附构型与吸附能

图035 示例数据

吸附能的分组比较

吸附能 · 双条件 · 多体系



本卡含 2 个展示版本；原编号：图035、图284。

比较不同体系在两种条件下的**吸附能与条件响应**，统一能量定义和单位，使绝对量级、排序及同体系变化清楚对应。同组图共用独立生成的数值，可按对比重点选择柱状或离散能级表达。

Illustrative data

应用参考：不同催化表面和吸附对象的吸附能比较

Adv. Mater. 2026, 38(2), e11345. Fig. 6c

DOI: 10.1002/adma.202511345

应用参考：位点修饰前后吸附能比较

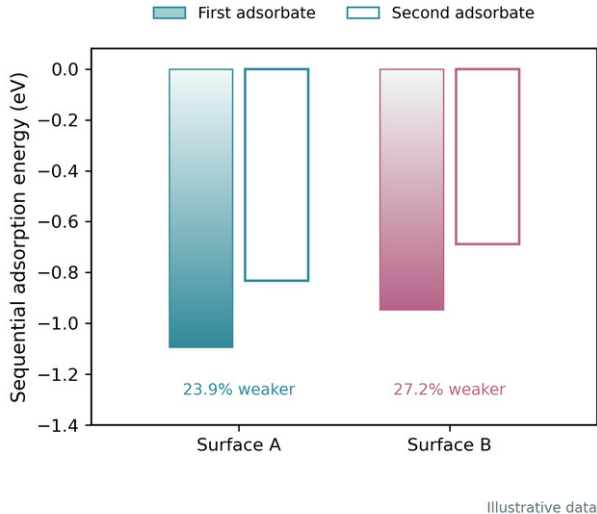
Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 5b

DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

图200 示例数据

顺次吸附能对比

顺次吸附 · 吸附能 · 位点对比



按材料或位点分组比较顺次吸附的能量，使用填充与空心柱区分不同吸附步骤，突出**后续吸附相对初次吸附的变化**。能量符号与共同参照保持一致，可与吸附构型、位点占据及反应路径联合分析吸附过程的差别。

Illustrative data

画法参考：不同吸附对象在多种表面上的能量对比

Adv. Mater. 2026, 38(2), e11345. Fig. 6c

DOI: 10.1002/adma.202511345

画法参考：不同对象吸附能的并列数值对比

Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 5b

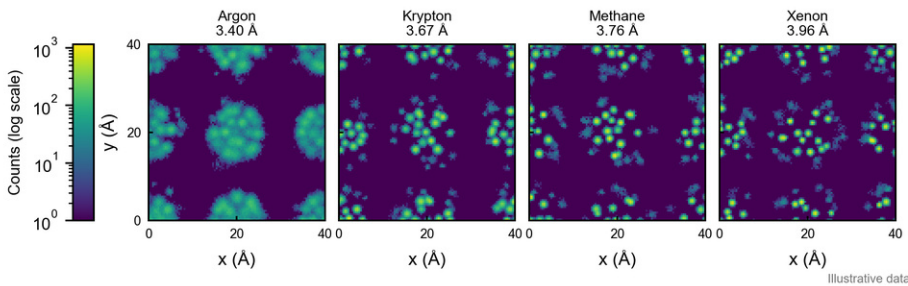
DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

吸附构型与吸附能

图202 示例数据

孔内空间占据分布

孔内分布 · 空间占据 · 共享色阶



将孔内位置计数转为二维热图，在共同空间范围和色阶下比较不同对象的分布，突出高占据区域、低占据区域及空间差异。并列面板便于对应孔道几何，可与吸附构型和迁移路径结合分析局部富集与空间可达性。

Illustrative data

应用参考：孔内吸附分子的空间位置

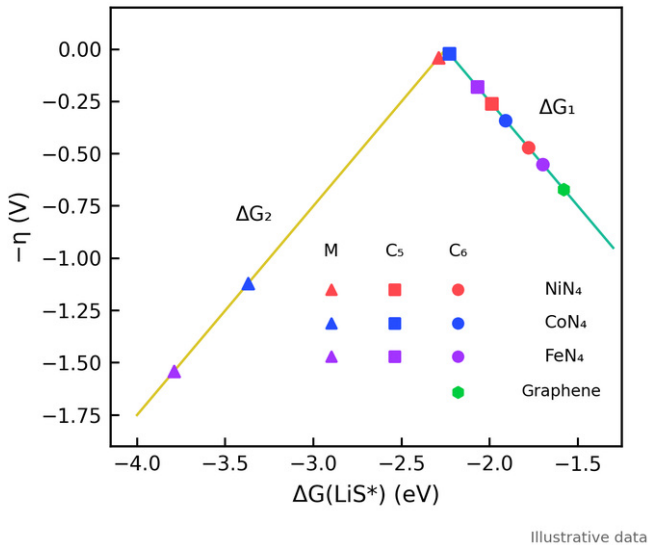
Nat. Commun. 2013, 4, 1538. Fig. 4a,b

DOI: 10.1038/ncomms2552

图191 示例数据

吸附自由能与过电势火山关系

吸附描述符 · 催化活性 · 火山关系



以吸附自由能为描述符，对照不同位点或材料的过电势响应，展示强吸附与弱吸附区间之间的活性变化。两侧分支反映不同限制条件，颜色与点形分别区分类别和位点，适合比较候选催化环境并与反应路径结果结合讨论。

Illustrative data

应用参考：吸附自由能与理论过电势火山关系

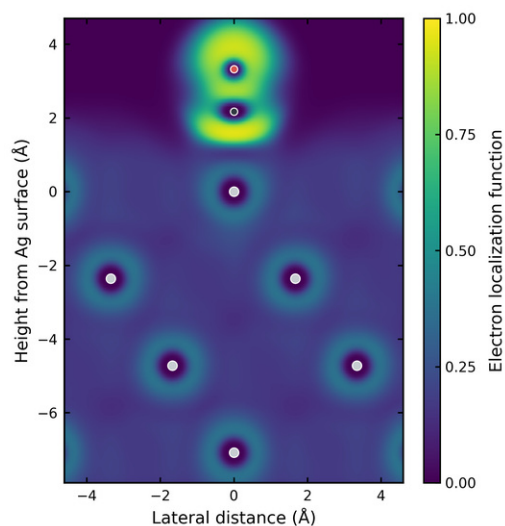
Nat. Commun. 2023, 14, 4449. Fig. 5a

DOI: 10.1038/s41467-023-40177-1

图040 独立计算

吸附界面的电子局域函数截面

ELF · 截面图 · 表面吸附



在穿过吸附位点的二维截面上，用连续色阶展示**电子局域化的空间差异**，并以原子位置连接几何结构与电子特征。该表达适合观察分子内部、吸附界面及表面层之间的分布变化，可与电荷差分、成键分析等图例配合，呈现界面电子结构的不同侧面。

Ag(111)-CO固定几何单点；截面穿过Ag-C-O，灰、深灰、珊瑚色圆点分别表示Ag、C、O。

画法参考：不同局部环境的二维电子局域函数截面

Adv. Mater. 2025, 37(32), 2419446. Fig. 5g,h

DOI: 10.1002/adma.202419446

画法参考：晶体电子局域函数二维截面

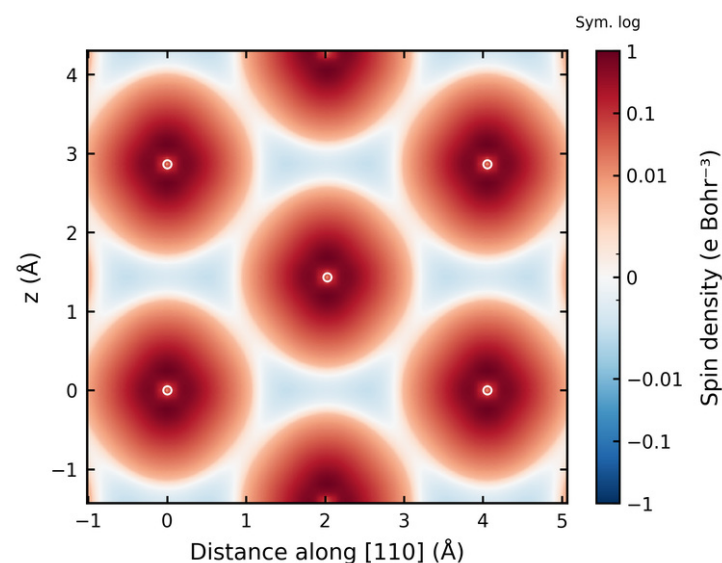
Nat. Mater. 2023, 22, 1175-1181. Fig. 3f,g

DOI: 10.1038/s41563-023-01631-z

图078 独立计算

自旋密度的周期空间分布

自旋密度 · 截面图 · 磁性



通过晶体截面展示**自旋局域与空间延展**，把 α 与 β 电子密度之差的正负区域同原子排列对应。正值表示 α 电子密度较高，负值表示 β 电子密度较高；对称对数色阶同时呈现强信号与弱信号区域，适合与局域磁矩、轨道和电子态分析共同组织磁性相关图例。

bcc Fe固定晶格单点；x=y截面，白圈为面内Fe原子，色标为对称对数。

画法参考：周期结构与自旋密度等值面叠加

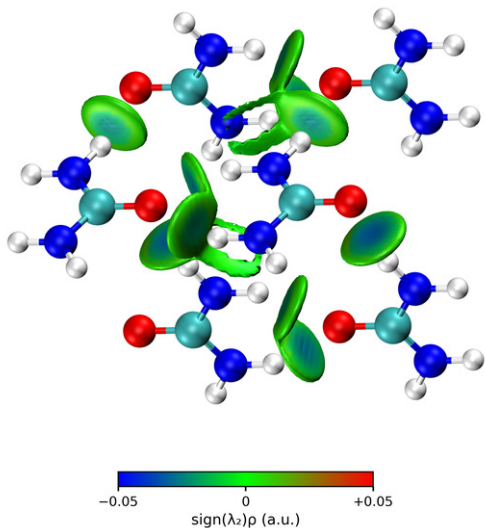
Nat. Commun. 2024, 15, 1039. Fig. 4c

DOI: 10.1038/s41467-024-45335-7

图276 独立计算

晶体片段的分子间相互作用场

IGMH · 氢键 · 晶体片段



将分子间IGMH等值面叠加到晶体片段骨架上，直观呈现**接触位置、相互作用方向与分子排列**。表面由 $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ 着色，帮助观察不同接触区的电子密度特征；适合表达分子晶体中的氢键网络与非共价接触，并与晶体结构、距离和角度图例相互对应。

尿素六分子晶体片段，固定实验几何；C、N、O、H为青、蓝、红、白，色标仅对应IGMH表面。

画法参考：分子间IGMH结合区域等值面

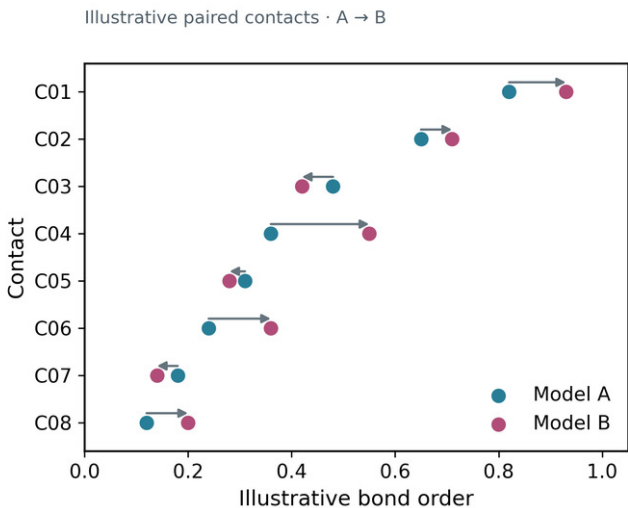
Nat. Commun. 2025, 16, 9718. Fig. 5c,d

DOI: 10.1038/s41467-025-64739-7

图038 示例数据

局部键级配对比较

局部键级 · 配对比较 · 成键变化



将同一组接触位点的键级成对排列，通过连接线显示**不同模型间成键指标的变化方向与幅度**。适合比较材料修饰、界面形成或局部配位变化后的相互作用，快速辨认变化最明显的位点，并与原子结构和电子局域性分析建立对应。

Illustrative data

应用参考：不同局部键的键级比较

Nat. Commun. 2025, 16, 4895. Fig. 1c

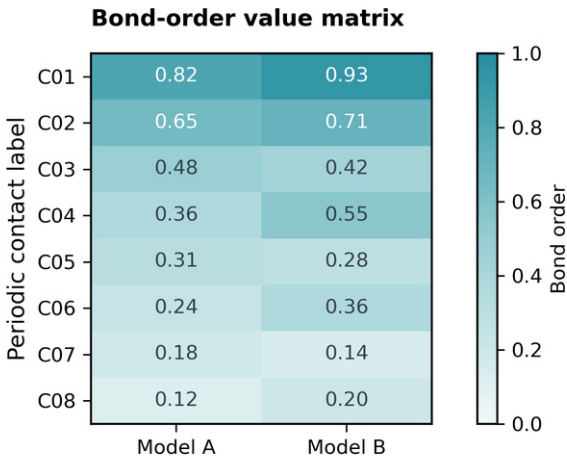
DOI: 10.1038/s41467-025-60171-z

电荷转移与成键分析

图081 示例数据

局部键级数值矩阵

局部键级 · 数值矩阵 · 模型对照



Illustrative values · not a calculation

按接触位点与模型排列键级，以统一色阶和数值标注突出**各个接触的绝对大小及模型间差异**。适合快速查阅局部成键指标，辨认变化集中的区域，并与配对点图、原子结构和电子局域函数共同展示材料修饰后的相互作用特征。

Illustrative data

应用参考：不同局部键的键级比较

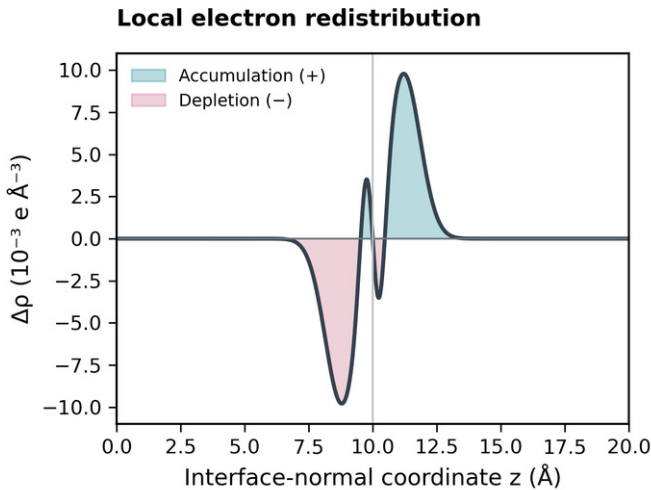
Nat. Commun. 2025, 16, 4895. Fig. 1c

DOI: 10.1038/s41467-025-60171-z

图039 示例数据

界面差分电荷线剖面

差分电荷 · 线剖面 · 电子重排



Illustrative values · not a calculation

沿界面法向展示差分电子密度，用正负填色区分**电子积累与耗损区域的位置和强度**。相较三维等值面，线剖面更便于比较峰位、作用范围及局部变化，可与界面结构、平面平均势和累计电子转移图结合分析界面电子重排。

Illustrative data

应用参考：界面法向平面平均差分电子密度

Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 4d

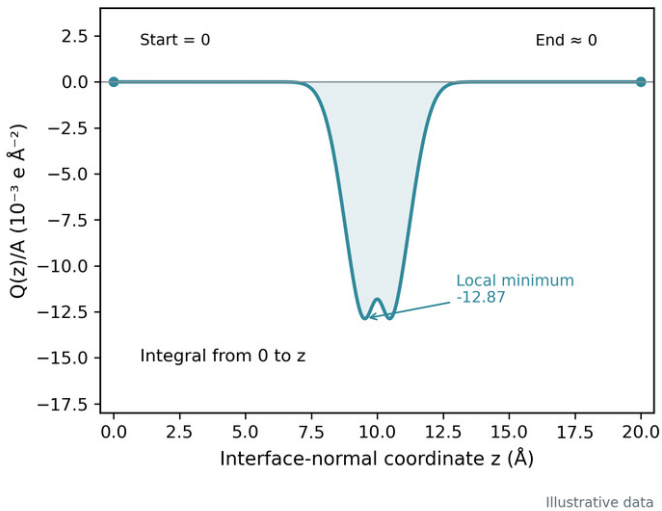
DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

电荷转移与成键分析

图082 示例数据

累计电子转移线剖面

累计积分 · 电子重排 · 界面法向



沿界面法向累计差分电子密度，突出**电子重排随积分范围的变化及其守恒关系**。与局部正负密度剖面配合，可区分局部积累、耗损和累计转移趋势，适合比较不同界面或表面修饰下的电子分布及作用范围。

Illustrative data

应用参考：界面法向差分电子密度

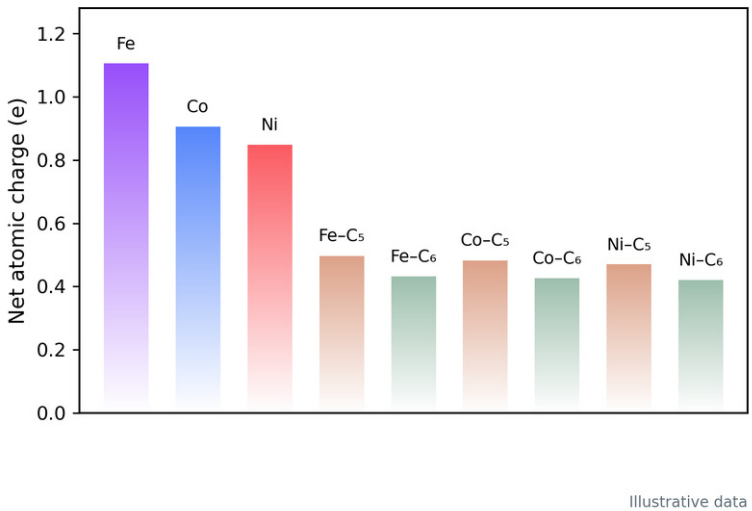
Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 4d

DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

图192 示例数据

局域原子电荷对比

原子电荷 · 局域位点 · 电荷转移



按原子位点并列展示电荷指标，突出**中心原子与邻近原子的电荷差异**。直接标注帮助辨认局部配位环境之间的变化，可与差分电荷密度、投影态密度和成键分析配合，用于说明电子重新分配及其与吸附或反应行为的联系。

Illustrative data

应用参考：局部原子Bader电荷比较

Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 4e

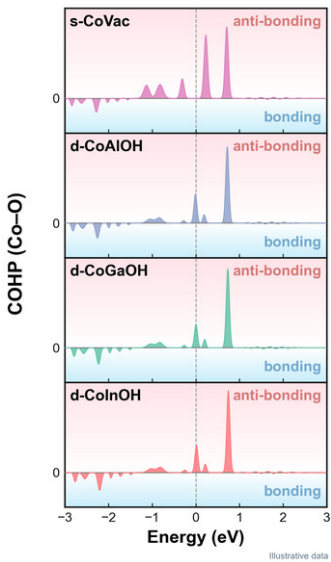
DOI: 10.1038/s41467-024-47624-7

电荷转移与成键分析

图193 示例数据

不同局域环境的成键谱

成键分析 · 成键谱 · 环境对比



将不同局域环境的成键谱按统一能量范围排列，以正负区域区分**成键与反键贡献的能量分布**。对齐的小面板便于比较峰位和谱形，可与吸附自由能、电荷及态密度结果建立对应，分析局域电子结构与化学键变化。

Illustrative data

画法参考：不同局部键的pCOHP成键谱

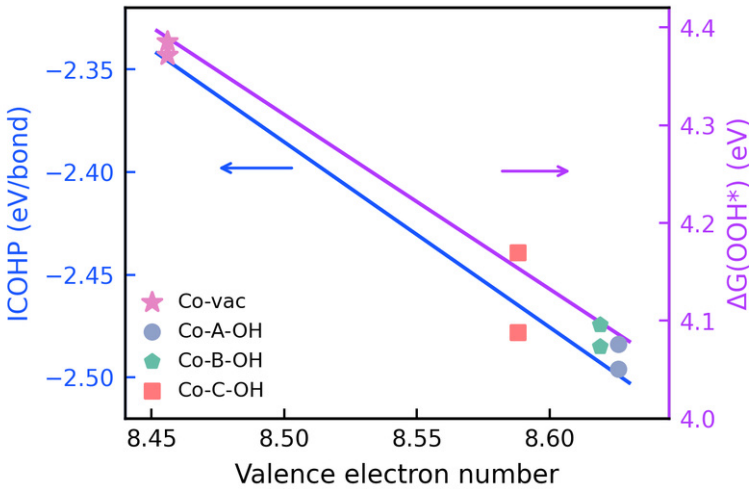
Nat. Mater. 2023, 22, 1175-1181. Fig. 3j

DOI: 10.1038/s41563-023-01631-z

图189 示例数据

成键与吸附双描述符关联

成键指标 · 吸附自由能 · 双轴关联



将电子数与成键、吸附描述符放在共同横坐标下，通过双纵轴保留各指标的量纲，展示**局域电子结构与吸附趋势的对应关系**。散点区分不同局部环境，趋势线帮助辨认变化方向，可与结构、电荷及反应自由能结果配合分析。

Illustrative data

应用参考：iCOHP与吸附自由能的双描述符关系

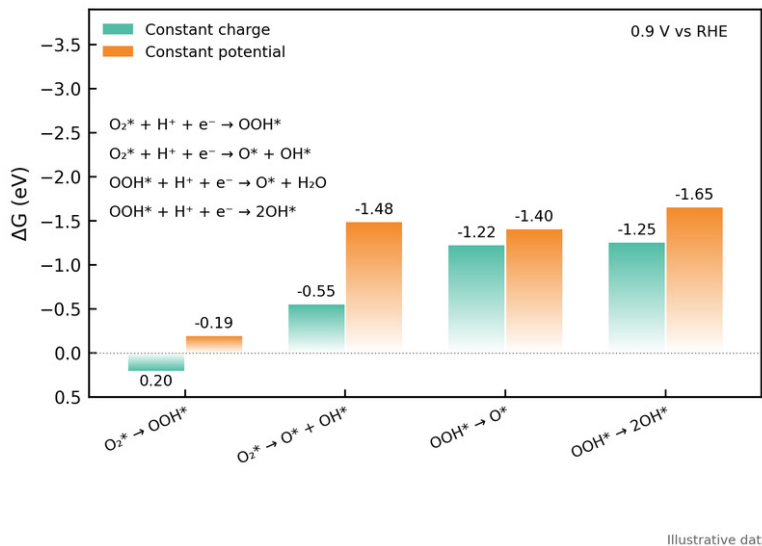
Nat. Commun. 2023, 14, 4766. Fig. 1f

DOI: 10.1038/s41467-023-40467-8

图088 示例数据

不同边界条件反应自由能对照

反应自由能 · 恒电势 · 分组柱图



用成对柱图对照不同电化学边界条件下的反应自由能，突出**各个竞争步骤的能量差别及条件响应**。适合比较恒电荷与恒电势描述对不同反应选择的影响，并与中间体结构、吸附能和反应机制图建立对应。

Illustrative data

应用参考：恒电势与恒电荷的反应能及势垒对照

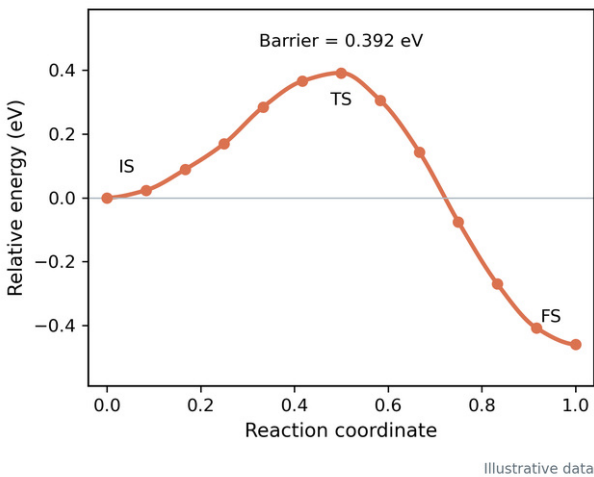
Nat. Commun. 2019, 10, 631. Supplementary Table 14 (SI p.11)

DOI: [10.1038/s41467-019-08419-3](https://doi.org/10.1038/s41467-019-08419-3)

图033 示例数据

表面反应能量路径

反应路径 · 活化能垒 · 表面催化



沿反应坐标呈现**初态、过渡区域与终态的相对能量**，将势垒高度和反应前后能量变化置于同一尺度。离散点与平滑连线共同展示路径轮廓，适合说明表面反应步骤、不同路径及条件变化。

Illustrative data

画法参考：沿反应坐标比较相对能量

Adv. Mater. 2026, 38(2), e11345. Fig. 6d

DOI: [10.1002/adma.202511345](https://doi.org/10.1002/adma.202511345)

应用参考：CO₂表面活化自由能路径

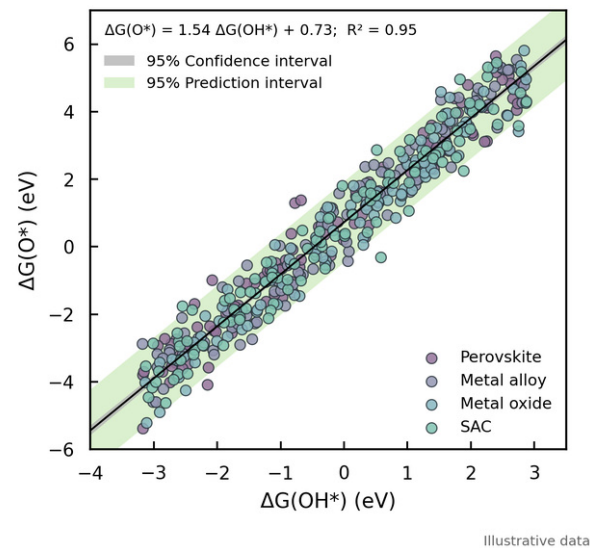
Nat. Commun. 2024, 15, 612. Fig. 3a,c-f

DOI: [10.1038/s41467-024-44896-x](https://doi.org/10.1038/s41467-024-44896-x)

图086 示例数据

吸附自由能标度关系

标度关系 · 线性回归 · 区间估计



用分类散点与线性拟合比较不同吸附物的自由能关系，突出**材料类别的分布、整体趋势与拟合不确定性**。置信区间和预测区间分别展示平均关系与个体变化范围，适合讨论吸附描述符的关联，并辅助比较不同催化材料的偏离程度。

Illustrative data

应用参考：吸附能的热力学线性标度关系

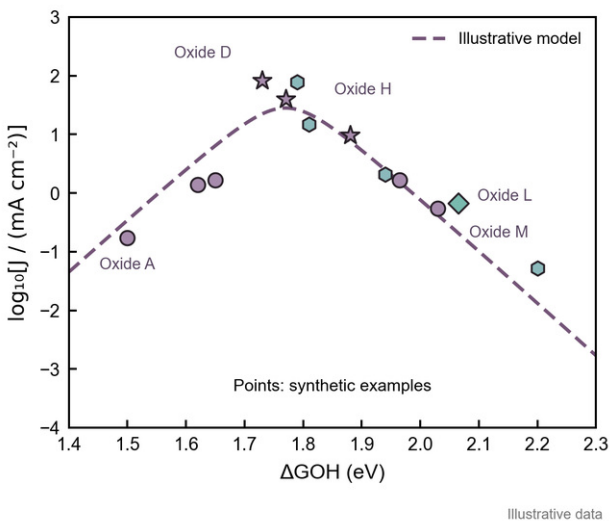
Nat. Catal. 2019, 2, 971-976. Fig. 1a

DOI: [10.1038/s41929-019-0376-6](https://doi.org/10.1038/s41929-019-0376-6)

图201 示例数据

吸附描述符与电流密度火山关系

吸附描述符 · 电流密度 · 火山关系



将吸附自由能与电流密度放在同一描述符图中，借助趋势曲线和分类散点展示**候选体系所在的活性区间**。对数响应坐标便于比较跨尺度变化，可与吸附构型和反应限制步骤配合，讨论材料性能与局域化学环境的联系。

Illustrative data

应用参考：吸附能描述符与催化活性火山关系

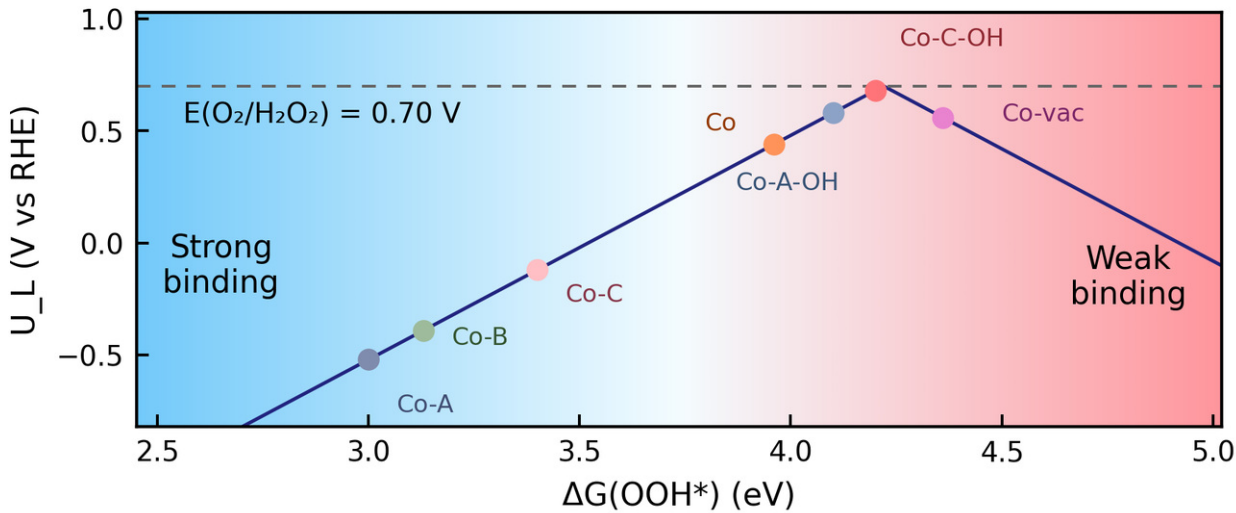
Nat. Catal. 2019, 2, 971-976. Fig. 1c,e

DOI: [10.1038/s41929-019-0376-6](https://doi.org/10.1038/s41929-019-0376-6)

图087 示例数据

限制电势与吸附能火山关系

火山关系 · 限制电势 · 吸附描述符



Illustrative data

沿吸附自由能展示限制电势，通过双分支和催化剂位置突出**强吸附与弱吸附区域之间的活性变化**。平衡电势参照便于比较候选体系距理想区间的差异，适合讨论吸附描述符与反应限制步骤，并与结构和自由能结果联合分析。

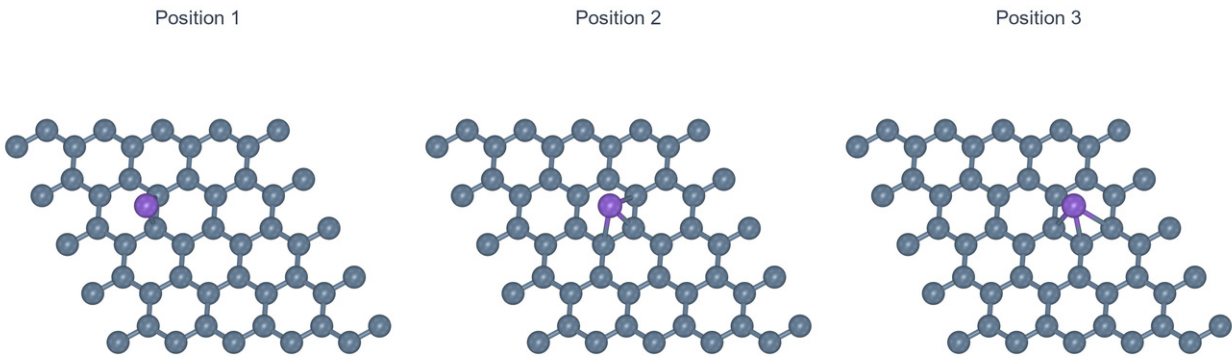
Illustrative data

应用参考：OOH吸附自由能与限制电势火山关系
Nat. Commun. 2023, 14, 4766. Fig. 1g
DOI: 10.1038/s41467-023-40467-8

图031 独立建模

表面迁移候选位置对照

结构 · 球棍



以共同骨架、视角和尺度对照离子在表面的不同候选位置，突出**迁移方向与局部环境的几何变化**。可用于说明路径构建和端点选择，并与真实路径优化及能垒结果配合使用。示例展示预设位置，不赋予中间位置过渡态身份。

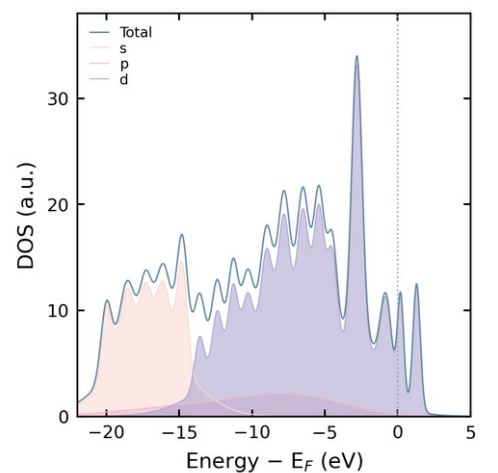
独立初始几何模型

画法参考：晶体迁移候选位置与迁移路线
Nat. Mater. 2024, 23, 535-542. Fig. 1a,b
DOI: [10.1038/s41563-024-01800-8](https://doi.org/10.1038/s41563-024-01800-8)

图194 示例数据

总态密度与轨道分量

总态密度 · 轨道分量 · 电子结构



Illustrative data

在同一能量参照下叠加总态密度与轨道分量，突出**不同能区的电子态组成**。浅色填充和总谱轮廓帮助辨认各分量的相对分布，可用于比较轨道杂化、占据态特征及结构变化产生的电子响应，并与成键或电荷分析配合。

Illustrative data

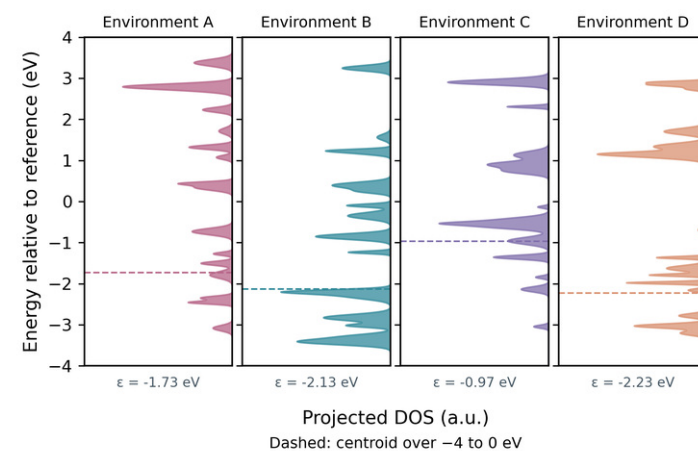
画法参考：总态密度与轨道投影态密度对照
Adv. Mater. 2026, 38(2), e11345. Fig. 5c,d
DOI: [10.1002/adma.202511345](https://doi.org/10.1002/adma.202511345)

画法参考：成键原子的轨道投影态密度
Nat. Mater. 2023, 22, 1175-1181. Fig. 3h
DOI: [10.1038/s41563-023-01631-z](https://doi.org/10.1038/s41563-023-01631-z)

图195 示例数据

投影态密度与占据态重心

投影态密度 · 态密度重心 · 局域环境



Illustrative data

用并列窄栏展示不同局域环境的**投影态密度形状与指定能量窗口的谱重心**，共用能量轴便于比较峰位及分布变化。虚线给出同一积分窗口内计算的谱重心，颜色区分环境，便于关联成键与吸附行为。

Illustrative data

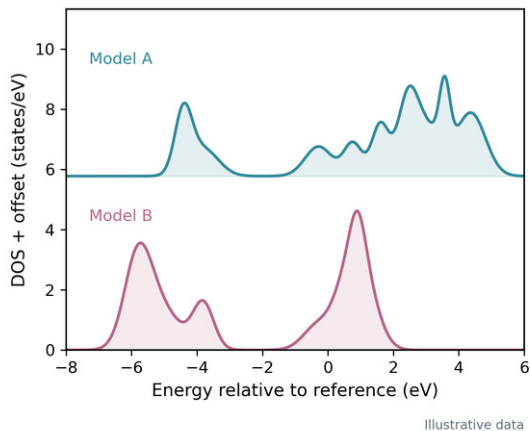
应用参考：投影态密度与价带中心
Adv. Mater. 2026, 38(2), e11345. Fig. 5d,e
DOI: [10.1002/adma.202511345](https://doi.org/10.1002/adma.202511345)

应用参考：投影态密度与d带中心对照
Nat. Commun. 2023, 14, 4766. Fig. 1d
DOI: [10.1038/s41467-023-40467-8](https://doi.org/10.1038/s41467-023-40467-8)

图005 示例数据

态密度曲线对比

态密度 · 电子结构 · 曲线对比



本卡含 2 个展示版本；原编号：图005、图215。

展示电子态在不同能量区间的分布，并以费米能级为参照比较**占据态、未占据态及带边附近的变化**。多条曲线错位排列，便于辨认峰位与谱形差异，可用于分析吸附、掺杂或界面形成前后的电子结构变化。

Illustrative data

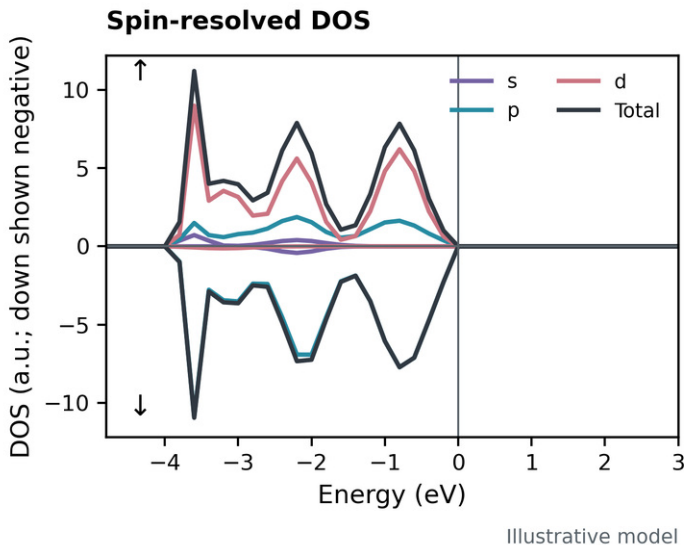
应用参考：表面位点的投影态密度
Adv. Mater. 2026, 38(40), e73723. Fig. 3g
DOI: [10.1002/adma.73723](https://doi.org/10.1002/adma.73723)

画法参考：不同局域环境PDOS对比
Nat. Commun. 2024, 15, 3212. Fig. 5d,g
DOI: [10.1038/s41467-024-47624-7](https://doi.org/10.1038/s41467-024-47624-7)

图034 示例数据

自旋分辨态密度

自旋 · 态密度 · 轨道分量



以上下镜像曲线区分自旋通道，并叠加各轨道与总态密度，突出**自旋不对称及不同轨道的电子态贡献**。费米能级参照帮助比较带边和占据态分布，可用于分析磁性材料、掺杂体系或界面形成前后的电子结构变化。

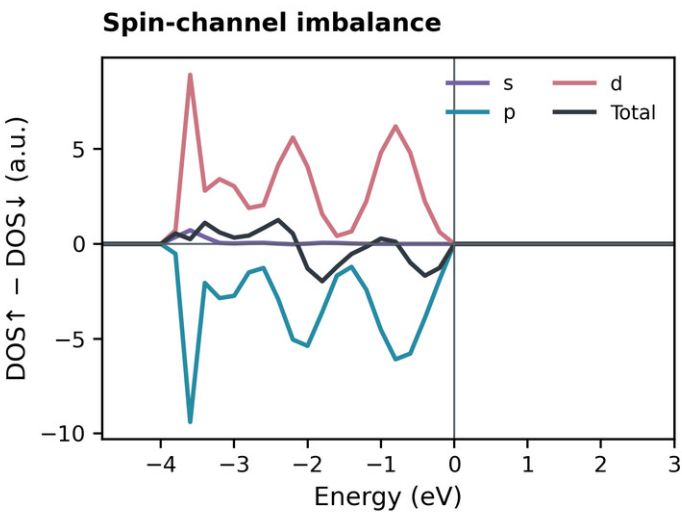
Illustrative data

画法参考：上下自旋通道的态密度
Nat. Commun. 2026, 17, 853. Fig. 1a,b
DOI: [10.1038/s41467-025-67561-3](https://doi.org/10.1038/s41467-025-67561-3)

图083 示例数据

自旋通道态密度差谱

自旋通道 · 态密度差 · 轨道贡献



Illustrative model

将自旋向上与向下态密度逐点相减，并对照各轨道和总量，突出**不同能量区间的自旋通道不平衡**。正负分布便于辨认各分量的抵消或增强，可与镜像自旋谱和原子结构配合，讨论不同材料状态下的电子结构变化。

Illustrative data

应用参考：自旋分辨态密度

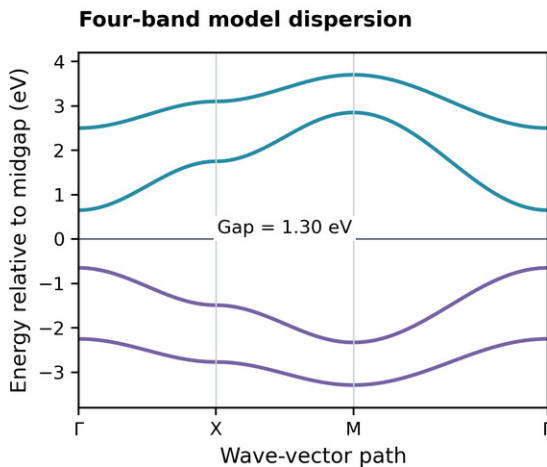
Nat. Commun. 2026, 17, 853. Fig. 1a,b

DOI: [10.1038/s41467-025-67561-3](https://doi.org/10.1038/s41467-025-67561-3)

图037 示例数据

能带色散与带隙

能带 · 带隙 · 色散关系



Illustrative model

沿波矢路径展示价带和导带的能量变化，以统一参照突出**带隙位置、带边形状与能带色散**。适合介绍半导体电子结构，比较厚度、掺杂或结构变化对带边的影响，并与态密度结果配合观察可用电子态及其能量分布。

Illustrative data

应用参考：表面位点修饰前后的能带色散及带隙

Adv. Mater. 2026, 38(40), e73723. Fig. 3e

DOI: [10.1002/adma.73723](https://doi.org/10.1002/adma.73723)

应用参考：无/有SOC的能带色散对比

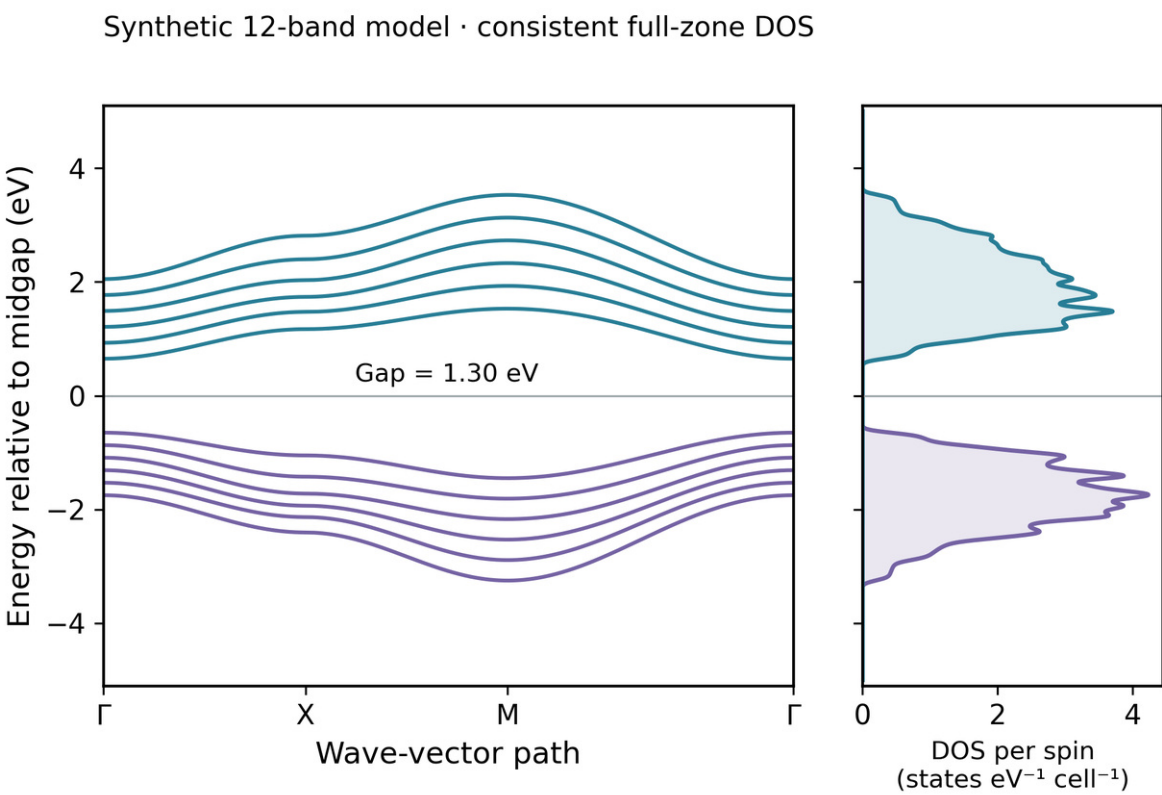
Nat. Commun. 2024, 15, 761. Fig. 1c,d

DOI: [10.1038/s41467-024-44972-2](https://doi.org/10.1038/s41467-024-44972-2)

图210 示例数据

能带与态密度联合展示

能带 · 态密度 · 共享能轴



将能带色散与态密度并列，共用能量尺度，展示**价带、导带、带隙和电子态分布**。不同颜色区分价带与导带，配套DOS呈现能量区间内的态密集程度，适合比较材料组成、结构修饰和掺杂带来的电子结构差异。

Illustrative data

画法参考：能带与投影态密度的互补展示
Adv. Mater. 2026, 38(40), e73723. Fig. 3e,g
DOI: [10.1002/adma.73723](https://doi.org/10.1002/adma.73723)

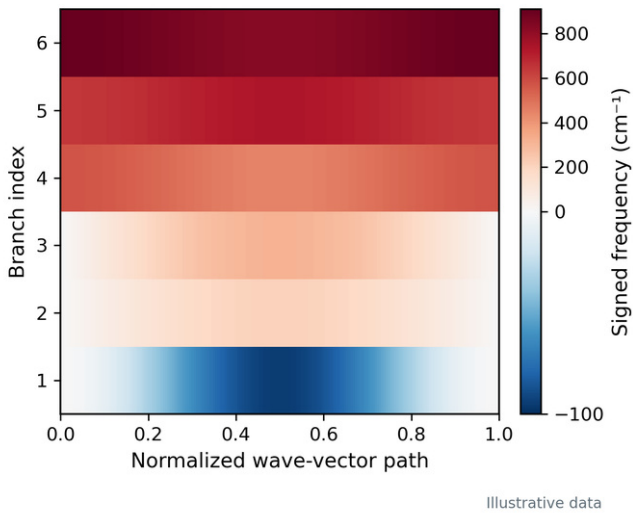
画法参考：能带与态密度共享能量坐标联合展示
Nat. Commun. 2024, 15, 1039. Fig. 4d,e
DOI: [10.1038/s41467-024-45335-7](https://doi.org/10.1038/s41467-024-45335-7)

晶体振动与声子

图085 示例数据

声子分支频率矩阵

声子分支 · 频率矩阵 · 波矢路径



将振动分支与波矢路径排列为矩阵，以双向色阶突出**频率分布和零频以下的区域**。适合整体查看多分支振动谱，辨认低频分支、频率集中区间及沿路径的变化，与色散曲线和模式结构配合比较不同晶体的振动特征。

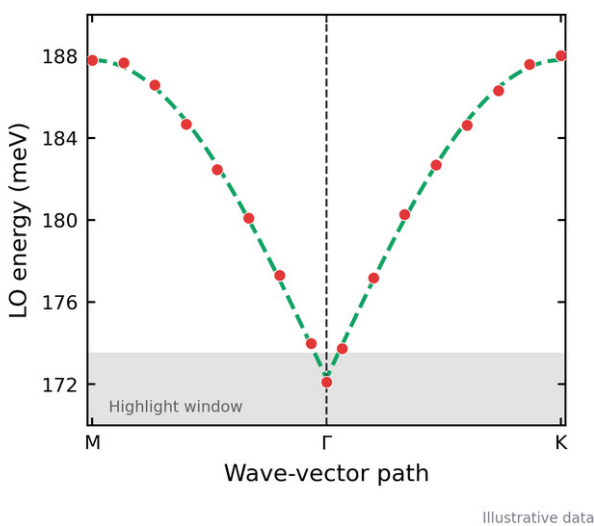
Illustrative data

应用参考：声子分支的动量与频率关系
Nat. Commun. 2024, 15, 1938. Fig. 2c,d; Fig. 3b,e
DOI: [10.1038/s41467-024-46229-4](https://doi.org/10.1038/s41467-024-46229-4)

图199 示例数据

光学声子分支色散

光学声子 · 分支色散 · 动量路径



沿动量路径对照声子分支曲线与离散采样点，突出**振动能量随波矢的变化**。统一路径标记便于观察局部极值和分支形态，适合比较不同模型或处理条件下的振动响应，并与完整声子谱及振动模式分析配合。

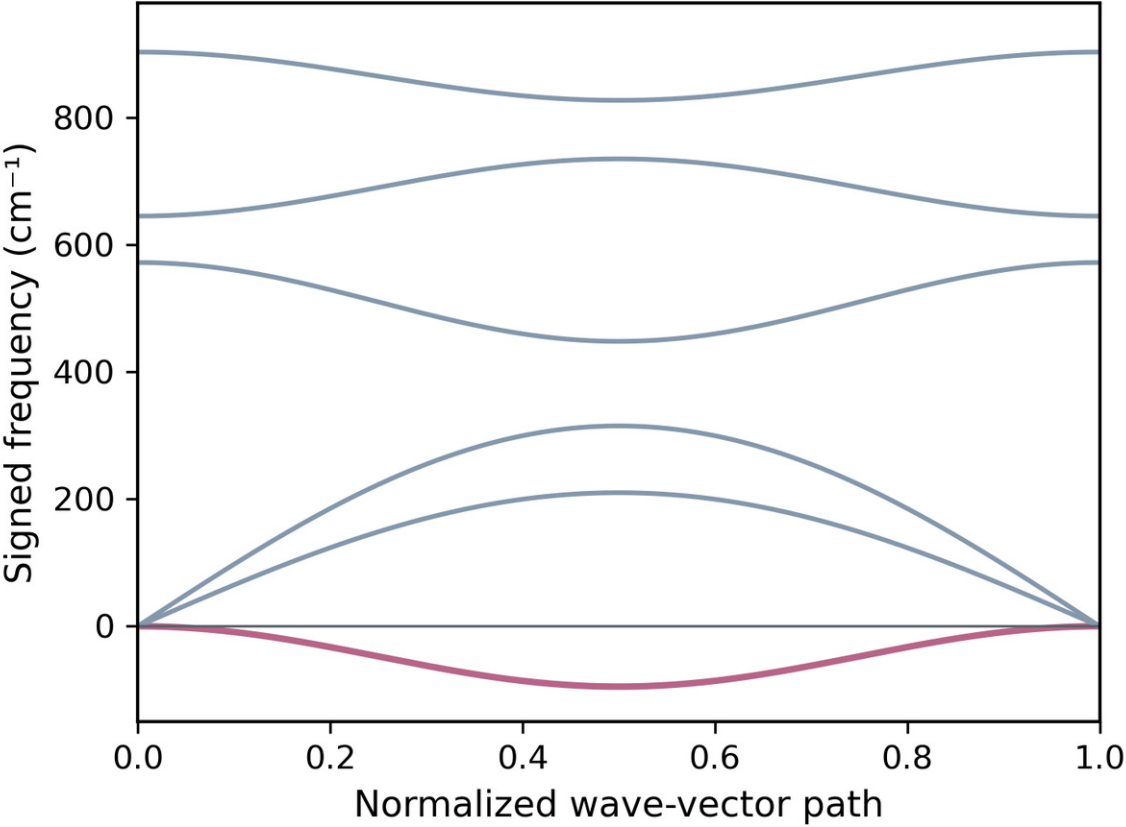
Illustrative data

应用参考：LO光学声子分支色散
Nat. Commun. 2024, 15, 1938. Fig. 3b,e
DOI: [10.1038/s41467-024-46229-4](https://doi.org/10.1038/s41467-024-46229-4)

图036 示例数据

声子色散与负频分支

声子色散 · 振动分支 · 负频模式



Illustrative data

沿波矢路径展示各振动分支的频率变化，并以颜色突出零频以下的分支区段。适合观察声学与光学分支的分布、分支交叉和软模特征，比较结构修饰前后的晶格振动变化；与相应收敛检查及模式分析结合，可讨论动力学稳定性。

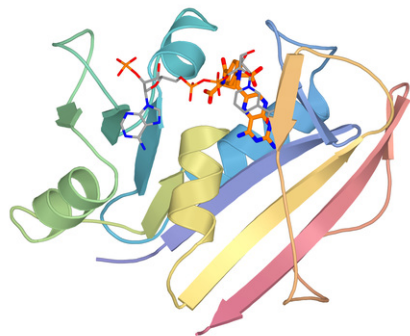
Illustrative data

应用参考：声子色散与动力学稳定性分析
Nat. Mater. 2023, 22, 311-315. Fig. 3b
DOI: [10.1038/s41563-023-01483-7](https://doi.org/10.1038/s41563-023-01483-7)

图290 公开结构

蛋白整体折叠与配体位置

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 7 个展示版本；原编号：图290、图094、图237、图238、图239、图241、图292。

以公开蛋白复合物展示**折叠、配体位置与局部环境**。Cartoon突出二级结构及连接关系，棒状配体保留元素区分，表面与局部视图帮助观察结合凹槽的形状和空间互补。适用于结构展示、结合位点定位，以及不同观察尺度之间的对应说明。

PDB 1U72 · 公开静态复合物

画法参考：蛋白cartoon、配体位置及构象叠合的结构表达

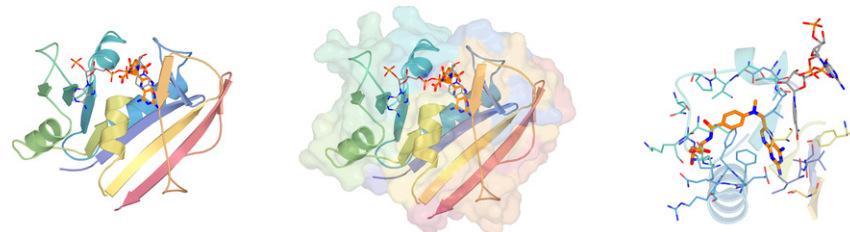
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1C,F,G

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图089 公开结构

蛋白整体、表面与口袋的组合展示

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 2 个展示版本；原编号：图089、图242。

以公开蛋白复合物展示**折叠、配体位置与局部环境**。Cartoon突出二级结构及连接关系，棒状配体保留元素区分，表面与局部视图帮助观察结合凹槽的形状和空间互补。适用于结构展示、结合位点定位，以及不同观察尺度之间的对应说明。

PDB 1U72 · 公开静态复合物

画法参考：结合位点、蛋白表面和局部口袋的尺度关联

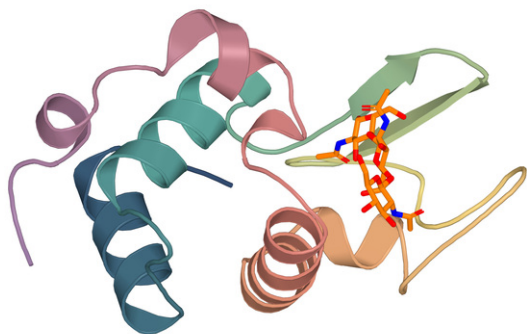
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1C,D

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图291 公开结构

蛋白整体折叠与糖配体位置

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 2 个展示版本；原编号：图291、图293。

以公开蛋白复合物展示**折叠、配体位置与局部环境**。Cartoon突出二级结构及连接关系，棒状配体保留元素区分，表面与局部视图帮助观察结合凹槽的形状和空间互补。适用于结构展示、结合位点定位，以及不同观察尺度之间的对应说明。

PDB 1LZB · 公开静态复合物

画法参考：蛋白cartoon、配体位置及构象叠合的结构表达

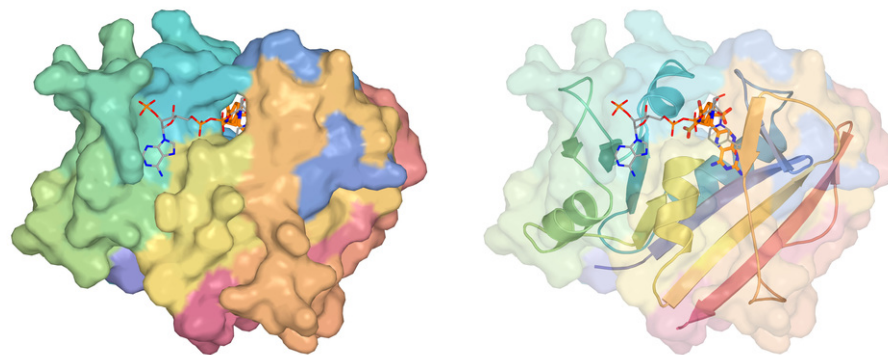
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1C,F,G

DOI: 10.1038/s41467-023-36956-5

图294 公开结构

蛋白表面与内部配体

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 5 个展示版本；原编号：图294、图093、图095、图277、图296。

以公开蛋白复合物展示**折叠、配体位置与局部环境**。Cartoon突出二级结构及连接关系，棒状配体保留元素区分，表面与局部视图帮助观察结合凹槽的形状和空间互补。适用于结构展示、结合位点定位，以及不同观察尺度之间的对应说明。

PDB 1U72 · 公开静态复合物

画法参考：结合位点、蛋白表面和局部口袋的尺度关联

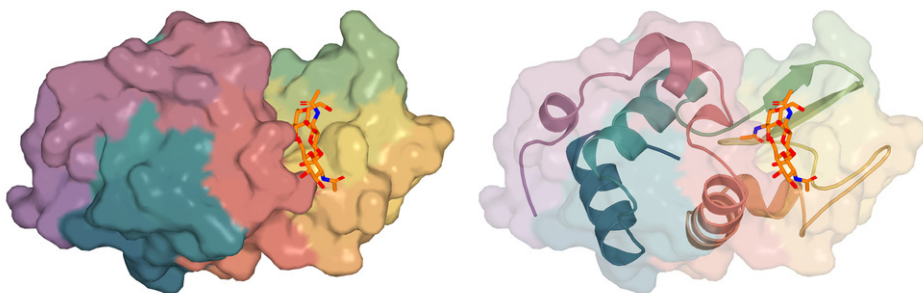
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1C,D

DOI: 10.1038/s41467-023-36956-5

图295 公开结构

蛋白表面与内部糖配体

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 2 个展示版本；原编号：图295、图297。

以公开蛋白复合物展示**折叠、配体位置与局部环境**。Cartoon突出二级结构及连接关系，棒状配体保留元素区分，表面与局部视图帮助观察结合凹槽的形状和空间互补。适用于结构展示、结合位点定位，以及不同观察尺度之间的对应说明。

PDB 1LZB · 公开静态复合物

画法参考：结合位点、蛋白表面和局部口袋的尺度关联

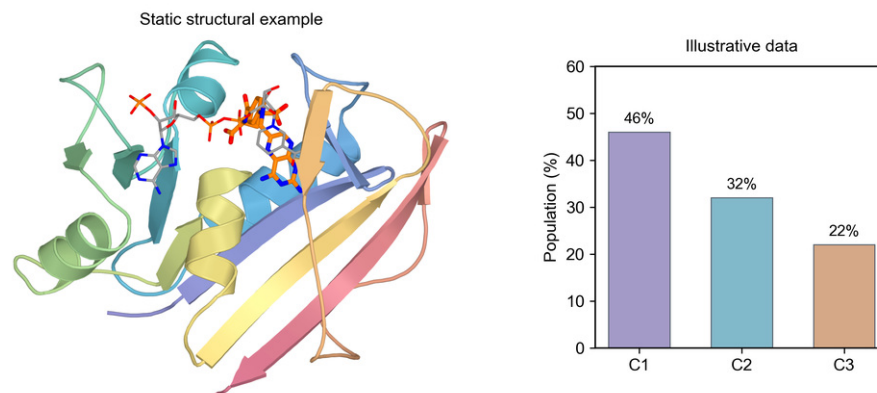
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1C,D

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图092 公开结构 + 示例数据

构象结构与占有率的组合表达

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



将**结构图与构象占有率**并列组织，可同时解释构象的空间特征与各类样本的相对分布。结构区域保留折叠和配体信息，柱形区域通过统一百分比尺度展示分布差异，适用于构象聚类结果的汇报。此处静态公开结构与独立示例统计分别演示两种表达，不建立数据对应。

PDB 1U72 静态结构；右侧为独立示例统计

应用参考：构象聚类、代表结构和相对簇占有率

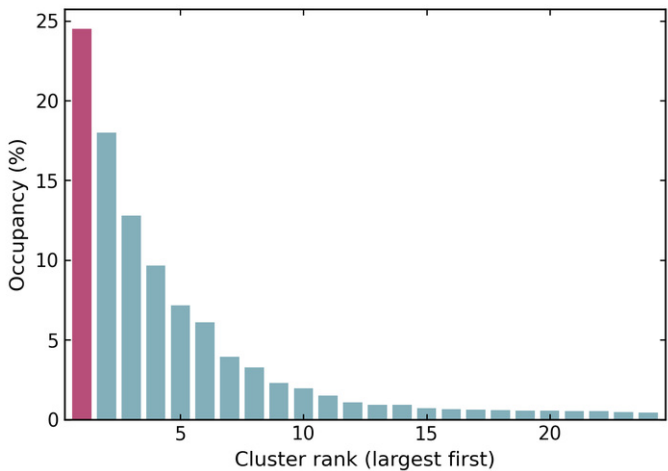
Nat. Commun. 2025, 16, 7808. Fig. 5c,d,h

DOI: [10.1038/s41467-025-63125-7](https://doi.org/10.1038/s41467-025-63125-7)

图047 示例数据

构象簇占有率排名

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以构象簇计数、占有率排名及累计曲线展示构象群体的分布。不同表达分别突出**优势构象、长尾小簇与代表集合的覆盖程度**，可辅助选择代表构象及比较构象分布的集中程度。

独立示例数据

应用参考：构象聚类、代表结构和相对簇占有率

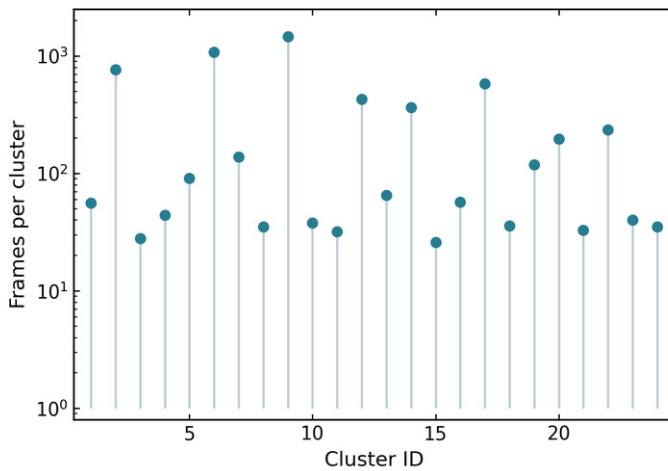
Nat. Commun. 2025, 16, 7808. Fig. 5c,d,h

DOI: 10.1038/s41467-025-63125-7

图228 示例数据

构象簇占有数的对数比较

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以构象簇计数、占有率排名及累计曲线展示构象群体的分布。不同表达分别突出**优势构象、长尾小簇与代表集合的覆盖程度**，可辅助选择代表构象及比较构象分布的集中程度。

独立示例数据

应用参考：构象聚类、代表结构和相对簇占有率

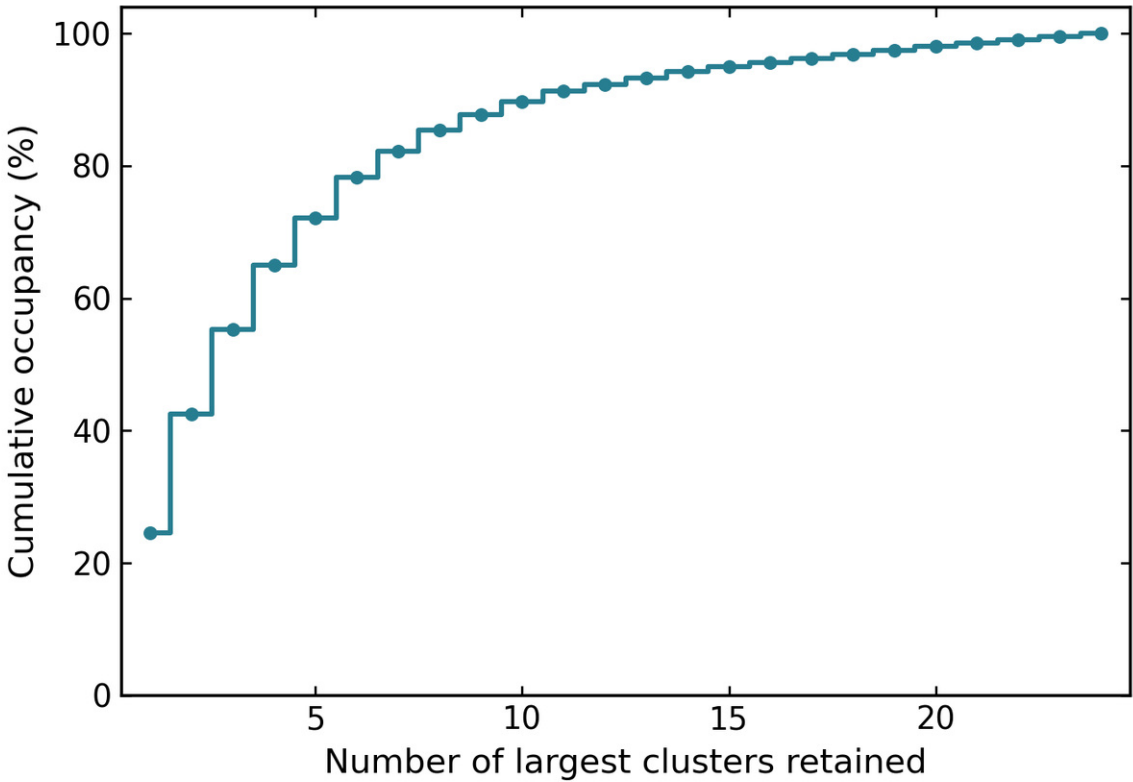
Nat. Commun. 2025, 16, 7808. Fig. 5c,d,h

DOI: 10.1038/s41467-025-63125-7

图100 示例数据

构象簇的累计占有率

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以构象簇计数、占有率排名及累计曲线展示构象群体的分布。不同表达分别突出**优势构象**、**长尾小簇与代表集合的覆盖程度**，可辅助选择代表构象及比较构象分布的集中程度。

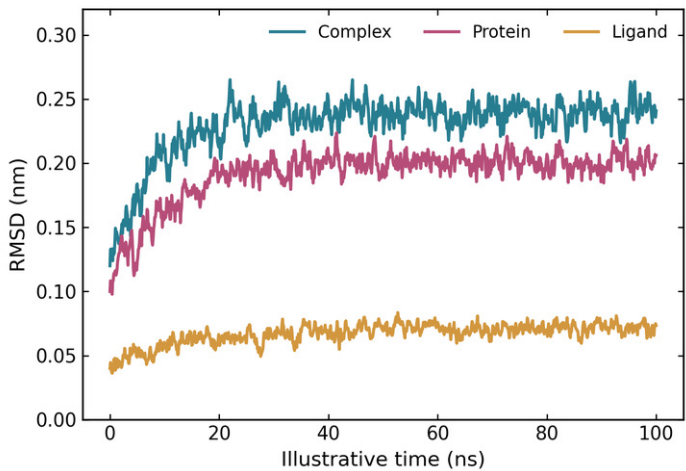
独立示例数据

应用参考：构象聚类、代表结构和相对簇占有率
Nat. Commun. 2025, 16, 7808. Fig. 5c,d,h
DOI: [10.1038/s41467-025-63125-7](https://doi.org/10.1038/s41467-025-63125-7)

图041 示例数据

RMSD与结构稳定性

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以均方根偏差展示结构相对参考构象的变化，便于比较**不同结构对象的变化幅度及稳定区间**。曲线可以辅助判断平衡过程和后续统计窗口，结构偏差仍需结合构象观察与其他指标解释。

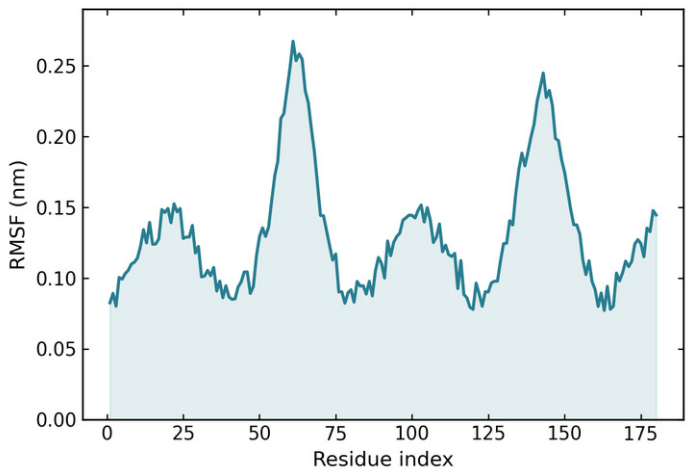
独立示例数据

画法参考：RMSD时间轨迹与构象变化比较
Nat. Commun. 2023, 14, 5739. Fig. 2d-f
DOI: 10.1038/s41467-023-41343-1

图042 示例数据

逐残基RMSF与局部柔性

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

沿残基索引展示局部均方根波动，突出**柔性峰与相对刚性区域**。适合比较局部环区、末端及其他片段的运动差异，并与结构位置或功能区域结合解释，避免只以全局平均值概括局部运动。

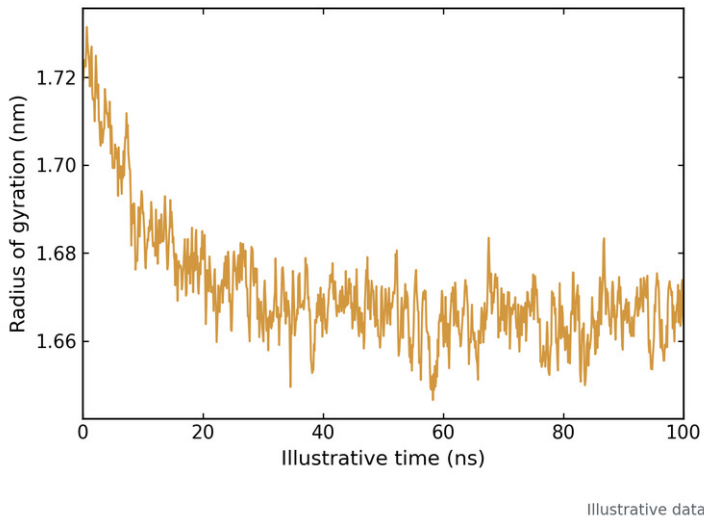
独立示例数据

应用参考：逐残基RMSF及局部柔性变化
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 3A
DOI: 10.1038/s41467-023-36956-5

图043 示例数据

回转半径与构象紧凑程度

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



用时间剖面展示结构或相互作用描述符的变化，观察**缓慢趋势、波动范围与阶段性变化**。相同时间坐标有助于关联构象紧凑程度、溶剂暴露及氢键数量等指标，为选择统计窗口提供线索。

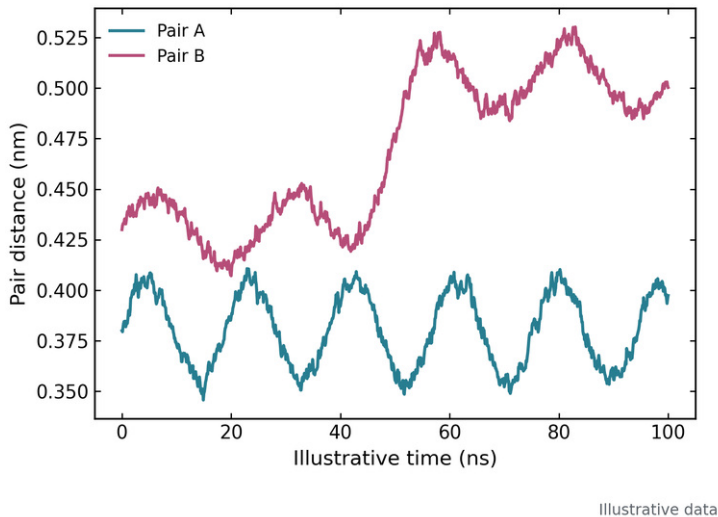
独立示例数据

应用参考：回转半径分析构象紧凑程度
Nat. Commun. 2022, 13, 5771.
DOI: 10.1038/s41467-022-33545-w

图243 示例数据

关键原子距离的时间变化

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



将关键原子间距离表示为时间曲线或累计分布，分别突出**距离变化的过程与分布范围**。适用于观察接近、分离或不同距离状态的切换，同源统计便于比较不同原子对的接触特征。

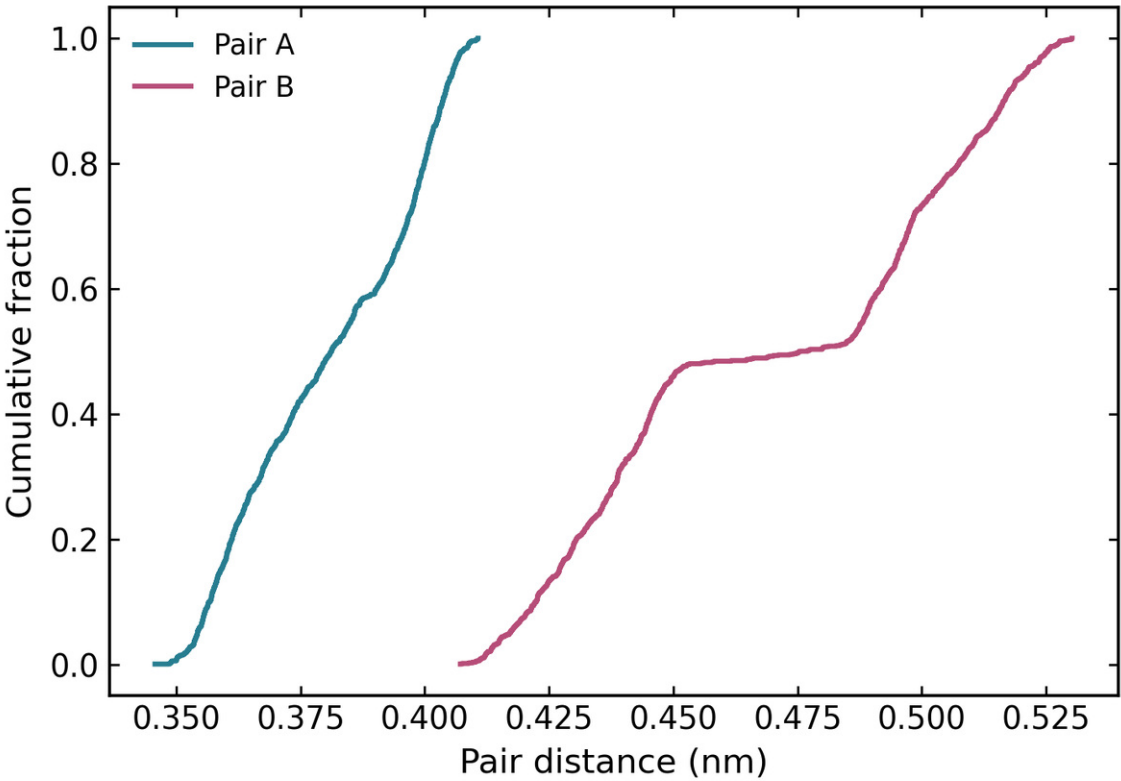
独立示例数据

应用参考：关键残基距离随时间变化表征构象变化
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 2B
DOI: 10.1038/s41467-023-36956-5

图097 示例数据

关键距离的经验累计分布

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

将关键原子间距离表示为时间曲线或累计分布，分别突出距离变化的过程与分布范围。适用于观察接近、分离或不同距离状态的切换，同源统计便于比较不同原子对的接触特征。

独立示例数据

画法参考：经验累积分布比较连续或离散数值

Nat. Commun. 2018, 9, 171. Fig. 7a-c

DOI: 10.1038/s41467-017-02213-9

应用参考：关键残基距离随时间变化表征构象变化

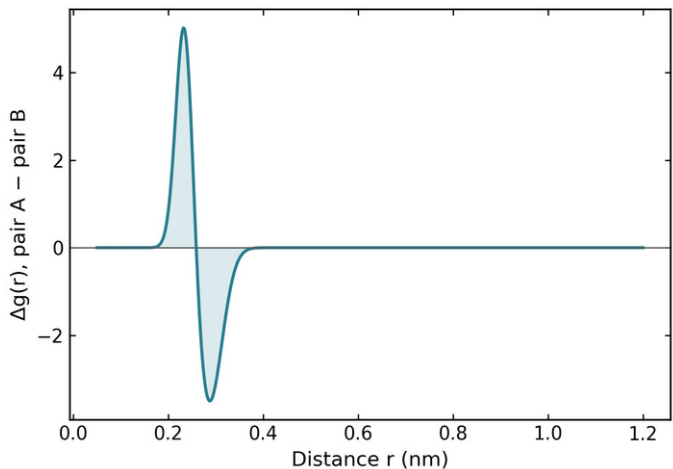
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 2B

DOI: 10.1038/s41467-023-36956-5

图045 示例数据

RDF差值与局部结构差异

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以径向分布刻画局部富集和相邻壳层，可比较不同原子对或环境下的**峰位、峰高与分布范围**。积分表达补充邻域内的平均配位信息，差值表达突出相同距离处的结构差异。

独立示例数据

应用参考：RDF及积分配位数分析局部溶剂化与相互作用

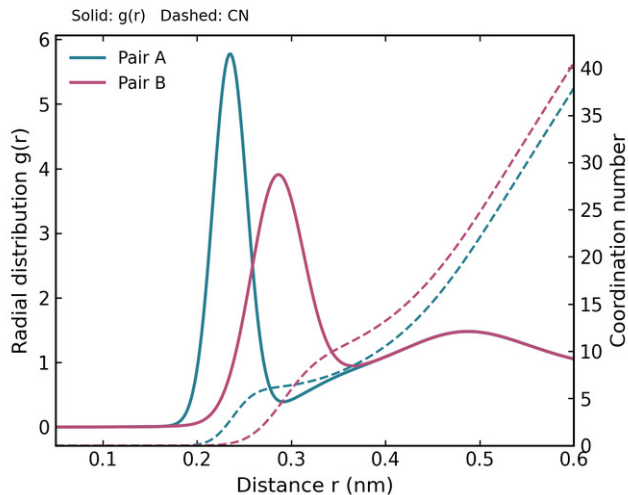
Nat. Commun. 2025, 16, 7404. Fig. 4d,f

DOI: 10.1038/s41467-025-62664-3

图226 示例数据

径向分布与积分配位数

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以径向分布刻画局部富集和相邻壳层，可比较不同原子对或环境下的**峰位、峰高与分布范围**。积分表达补充邻域内的平均配位信息，差值表达突出相同距离处的结构差异。

独立示例数据

应用参考：RDF及积分配位数分析局部溶剂化与相互作用

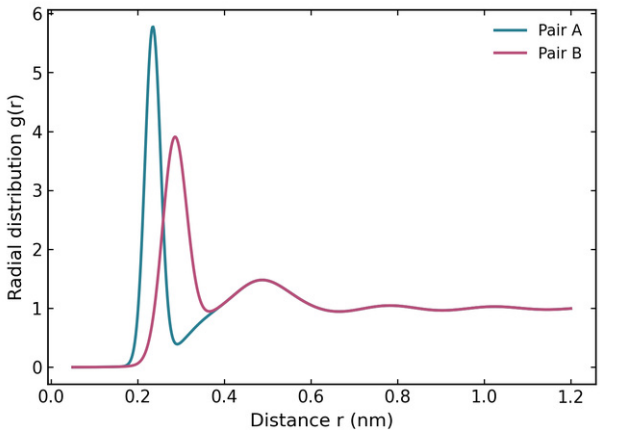
Nat. Commun. 2025, 16, 7404. Fig. 4d,f

DOI: 10.1038/s41467-025-62664-3

图007 示例数据

径向分布函数：RDF对比

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

重复图已归并；原编号：图007、图216。

以径向分布刻画局部富集和相邻壳层，可比较不同原子对或环境下的**峰位、峰高与分布范围**。积分表达补充邻域内的平均配位信息，差值表达突出相同距离处的结构差异。

独立示例数据

应用参考：RDF及积分配位数分析局部溶剂化与相互作用

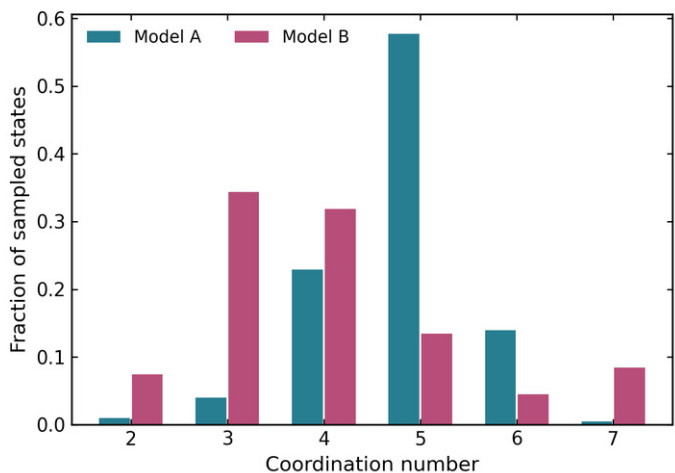
Nat. Commun. 2025, 16, 7404. Fig. 4d,f

DOI: 10.1038/s41467-025-62664-3

图098 示例数据

局部配位数的状态比例

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以离散序列展示局部配位状态的变化，并以状态比例概括各配位数的相对出现频率。两种表达分别突出**状态切换与总体分布**，可用于比较溶剂化环境、配体交换或局部邻域差异。

独立示例数据

画法参考：离散配位数的频数分布与不同条件比较

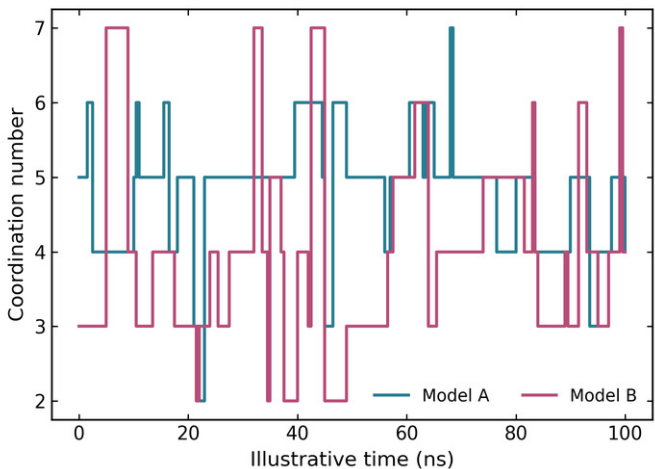
Nat. Commun. 2026, 17, 3662. Fig. 2h

DOI: 10.1038/s41467-026-70266-w

图050 示例数据

局部配位数的离散状态演化

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以离散序列展示局部配位状态的变化，并以状态比例概括各配位数的相对出现频率。两种表达分别突出**状态切换与总体分布**，可用于比较溶剂化环境、配体交换或局部邻域差异。

独立示例数据

画法参考：离散状态随时间切换的序列及状态时间条

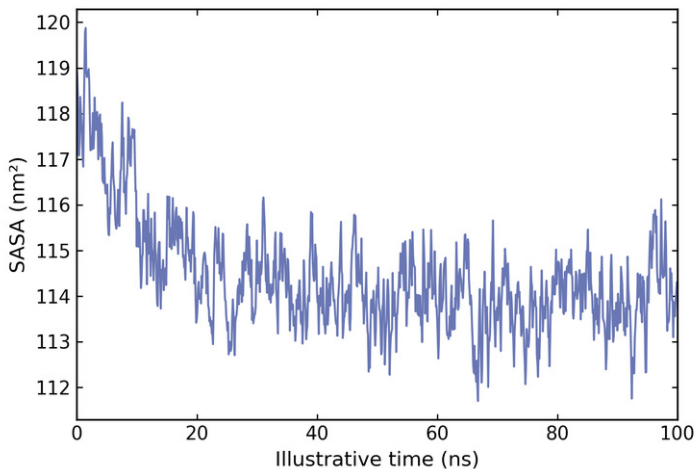
Nat. Methods 2015, 12, 838-840. Supplementary Fig. 7a; Fig. 3e

DOI: [10.1038/nmeth.3483](https://doi.org/10.1038/nmeth.3483)

图222 示例数据

溶剂可及表面积的时间变化

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

用时间剖面展示结构或相互作用描述符的变化，观察**缓慢趋势、波动范围与阶段性变化**。相同时间坐标有助于关联构象紧凑程度、溶剂暴露及氢键数量等指标，为选择统计窗口提供线索。

独立示例数据

画法参考：SASA信号的时间变化、误差与动力学对比

J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 18413-18419. Fig. 2; Fig. 1B

DOI: [10.1021/ja207470h](https://doi.org/10.1021/ja207470h)

图302 公开结构

配体与结合口袋

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 4 个展示版本；原编号：图302、图096、图240、图304。

以公开复合物的原位配体为中心，展示**近邻残基、共存辅因子与局部空间关系**。配体采用醒目碳色，残基用较细棒状表示，杂原子按元素区分；背景Cartoon可帮助追踪口袋在蛋白折叠中的位置。适用于比较结合位点环境与解释局部几何接触。

PDB 1U72 · 公开静态复合物

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

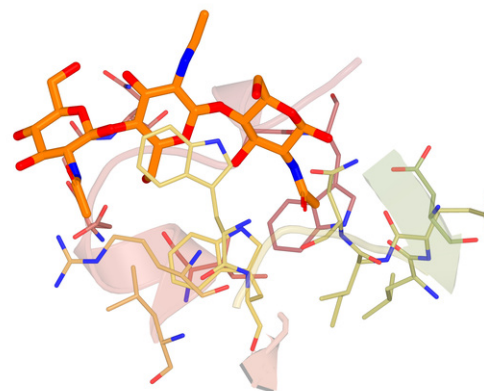
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图303 公开结构

糖配体与结合口袋

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 2 个展示版本；原编号：图303、图305。

以公开复合物的原位配体为中心，展示**近邻残基、共存辅因子与局部空间关系**。配体采用醒目碳色，残基用较细棒状表示，杂原子按元素区分；背景Cartoon可帮助追踪口袋在蛋白折叠中的位置。适用于比较结合位点环境与解释局部几何接触。

PDB 1LZB · 公开静态复合物

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图306 公开结构

配体与近邻残基

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 2 个展示版本；原编号：图306、图308。

以公开复合物的原位配体为中心，展示**近邻残基、共存辅因子与局部空间关系**。配体采用醒目碳色，残基用较细棒状表示，杂原子按元素区分；背景Cartoon可帮助追踪口袋在蛋白折叠中的位置。适用于比较结合位点环境与解释局部几何接触。

PDB 1U72 · 公开静态复合物

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

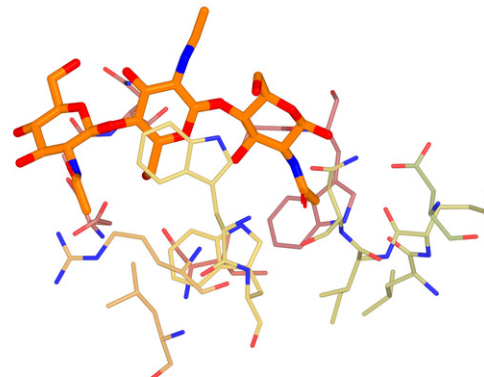
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图307 公开结构

糖配体与近邻残基

蛋白结构 · 结合口袋 · 静态结构



本卡含 2 个展示版本；原编号：图307、图309。

以公开复合物的原位配体为中心，展示**近邻残基、共存辅因子与局部空间关系**。配体采用醒目碳色，残基用较细棒状表示，杂原子按元素区分；背景Cartoon可帮助追踪口袋在蛋白折叠中的位置。适用于比较结合位点环境与解释局部几何接触。

PDB 1LZB · 公开静态复合物

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

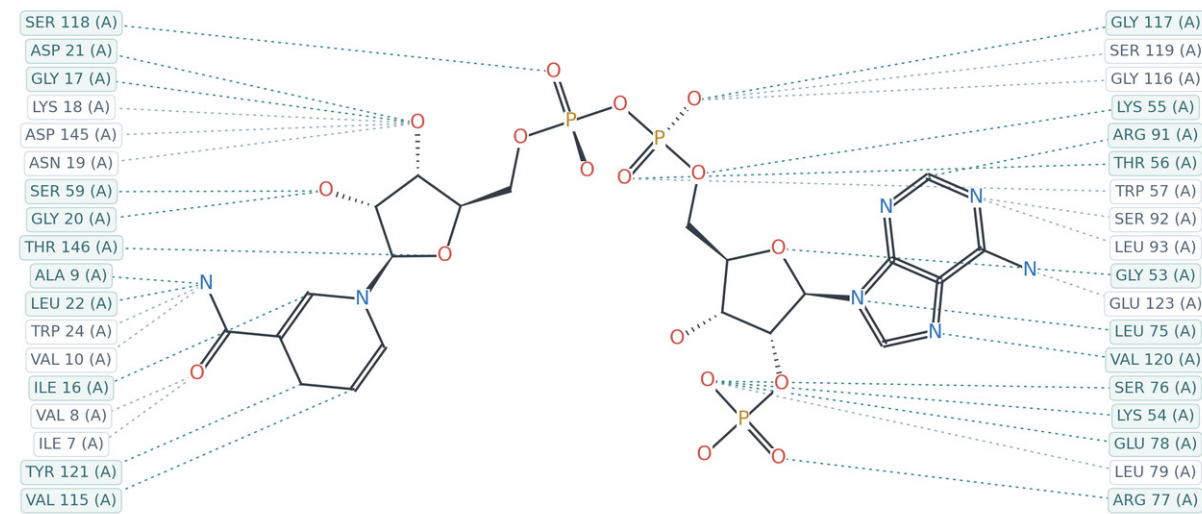
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图310 公开结构

公开静态构象的二维残基接触

二维接触 · 静态结构 · 公开蛋白



以配体的二维化学骨架连接邻近残基，展示**接触位置、残基身份和最近重原子距离**。连线突出局部空间邻近关系，可用于比较配体各区域与口袋环境的接触，并与三维结构或距离矩阵互相参照。

PDB 1U72; NDP A187; 重原子距离 $\leq 5 \text{ \AA}$

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

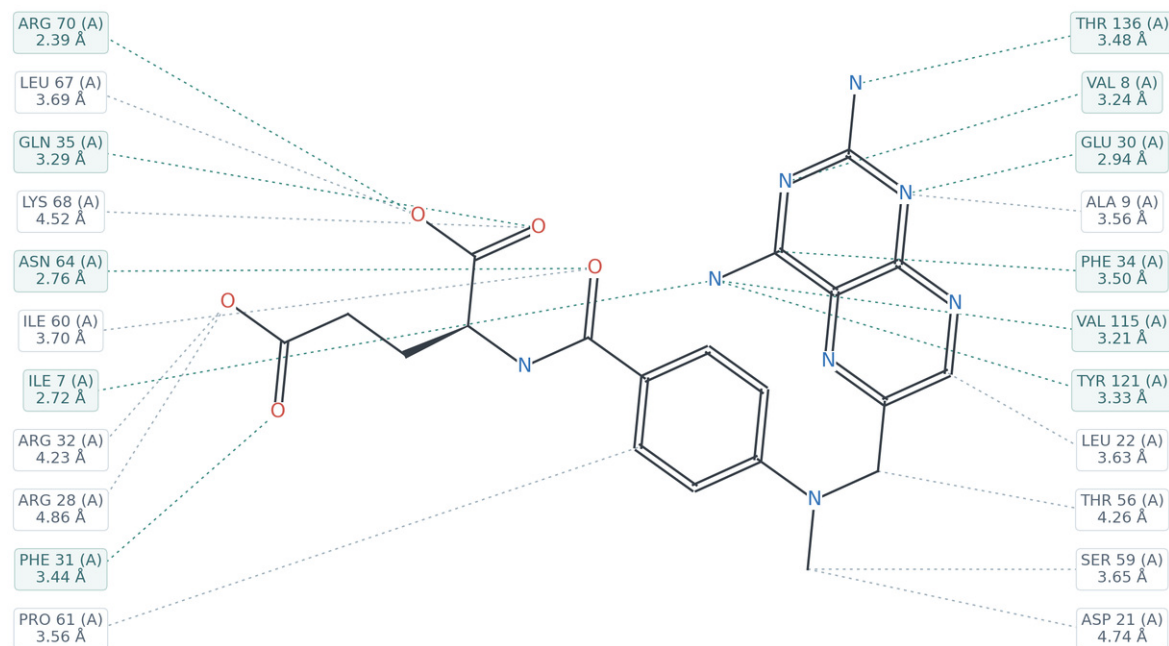
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图300 公开结构

配体与残基二维接触图

二维接触 · 静态结构 · 公开蛋白

Nearest heavy-atom distance; $d \leq 3.5 \text{ \AA}$ highlighted

本卡含 2 个展示版本；原编号：图300、图298。

以配体的二维化学骨架连接邻近残基，展示**接触位置、残基身份和最近重原子距离**。连线突出局部空间邻近关系，可用于比较配体各区域与口袋环境的接触，并与三维结构或距离矩阵互相参照。

PDB 1U72; MTX A188; 重原子距离 $\leq 5 \text{ \AA}$

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

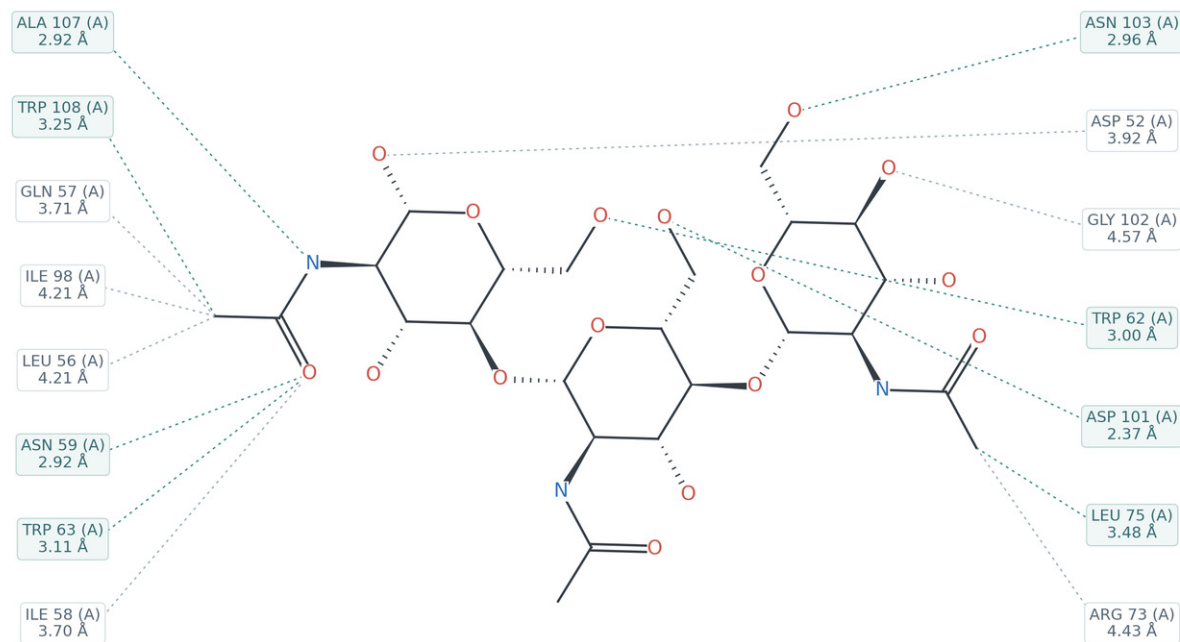
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图301 公开结构

糖配体与残基二维接触图

二维接触 · 静态结构 · 公开蛋白

Nearest heavy-atom distance; $d \leq 3.5 \text{ \AA}$ highlighted

本卡含 2 个展示版本；原编号：图301、图299。

以配体的二维化学骨架连接邻近残基，展示**接触位置、残基身份和最近重原子距离**。连线突出局部空间邻近关系，可用于比较配体各区域与口袋环境的接触，并与三维结构或距离矩阵互相参照。

PDB 1LZB; tri-NAG B1-B3; 重原子距离 $\leq 5 \text{ \AA}$

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

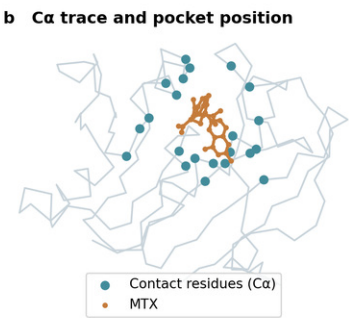
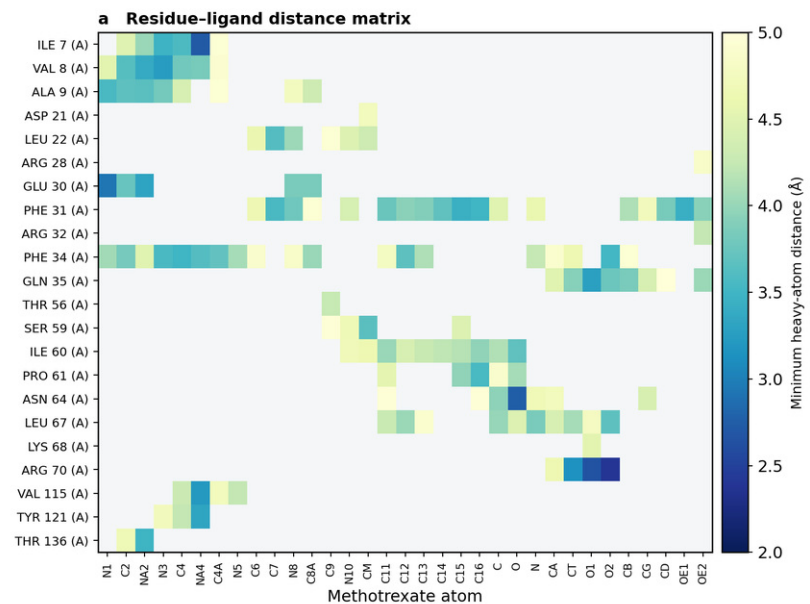
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: [10.1038/s41467-023-36956-5](https://doi.org/10.1038/s41467-023-36956-5)

图235 公开结构

配体残基距离矩阵与结构定位

距离矩阵 · 结构定位 · 静态接触



将配体原子与邻近残基的最小重原子距离组成矩阵，并与**三维骨架和口袋位置**并列对应。颜色展示近邻距离分布，结构视图帮助定位相应残基，适用于解释静态复合物中不同配体区域的局部几何环境。

PDB 1U72; MTX A188; 重原子距离 ≤ 5 Å

应用参考：配体在结合口袋中的局部结构与残基空间关系

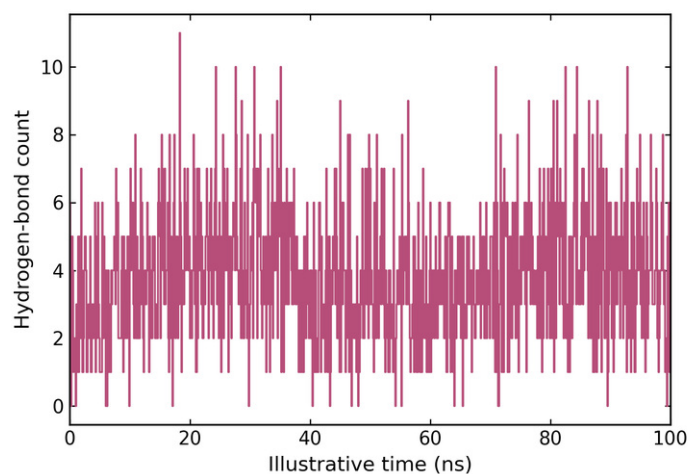
Nat. Commun. 2023, 14, 1885. Fig. 1D,F

DOI: 10.1038/s41467-023-36956-5

图044 示例数据

氢键数量随时间变化

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

用时间剖面展示结构或相互作用描述符的变化，观察**缓慢趋势、波动范围与阶段性变化**。相同时间坐标有助于关联构象紧凑程度、溶剂暴露及氢键数量等指标，为选择统计窗口提供线索。

独立示例数据

应用参考：氢键数量随时间和残基氢键占有率

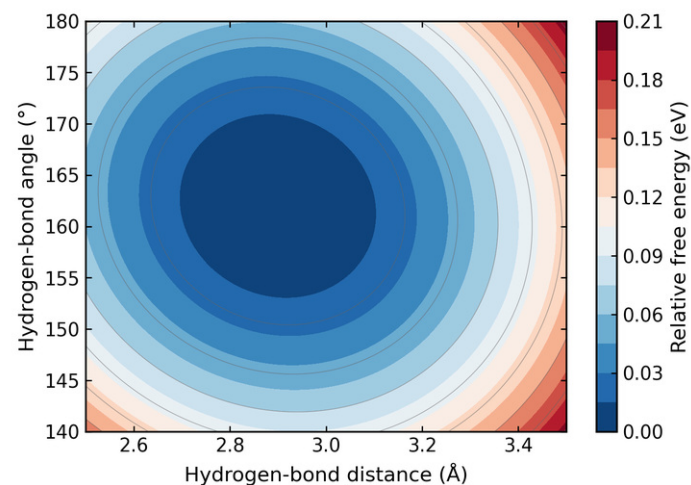
Nat. Commun. 2022, 13, 5771. Fig. 3e; Fig. 5a

DOI: [10.1038/s41467-022-33545-w](https://doi.org/10.1038/s41467-022-33545-w)

图218 示例数据

氢键几何与自由能分布

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

在氢键距离与角度构成的二维空间中展示相对自由能，帮助识别**偏好几何区域与几何耦合**。等高线与连续色阶共同呈现分布范围，适用于比较不同环境下的氢键几何特征。

独立示例数据

画法参考：两种几何描述符上的二维自由能景观

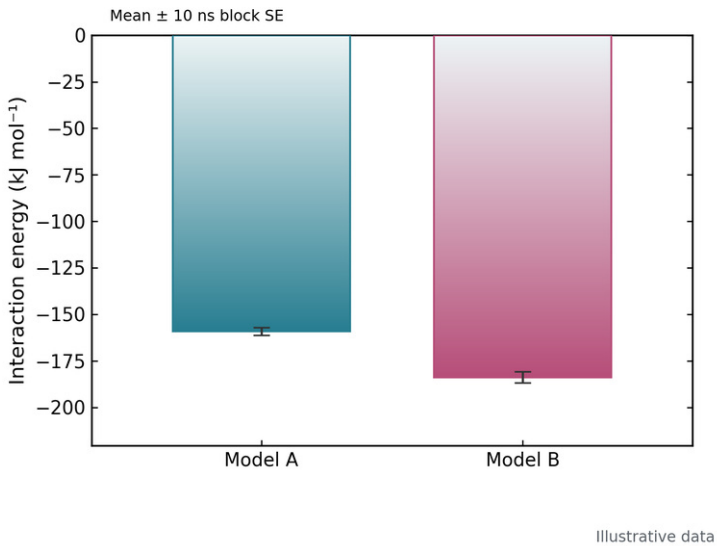
Nat. Commun. 2026, 17, 1498. Supplementary Fig. S1a

DOI: [10.1038/s41467-026-69356-6](https://doi.org/10.1038/s41467-026-69356-6)

图246 示例数据

短程相互作用能：柱状图与块标准误

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



展示短程非键相互作用能及其组分，比较**静电**、**范德华作用与合计贡献**。时间曲线保留变化过程，块均值统计概括平均水平和波动；分量及合计采用一致的能量单位与符号。

独立示例数据

画法参考：相互作用能贡献的方向、幅度及均值误差表达

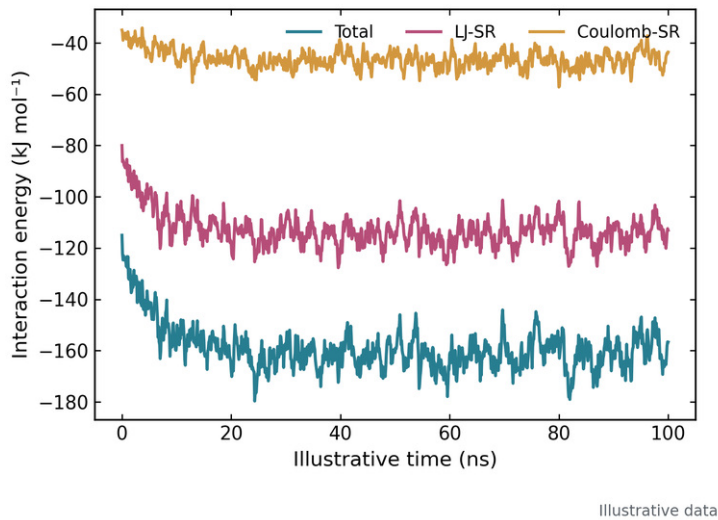
Nat. Commun. 2024, 15, 2638. Fig. 2a

DOI: 10.1038/s41467-024-46881-w

图224 示例数据

非键相互作用能的时间变化

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



展示短程非键相互作用能及其组分，比较**静电**、**范德华作用与合计贡献**。时间曲线保留变化过程，块均值统计概括平均水平和波动；分量及合计采用一致的能量单位与符号。

独立示例数据

画法参考：相互作用能贡献的方向、幅度及均值误差表达

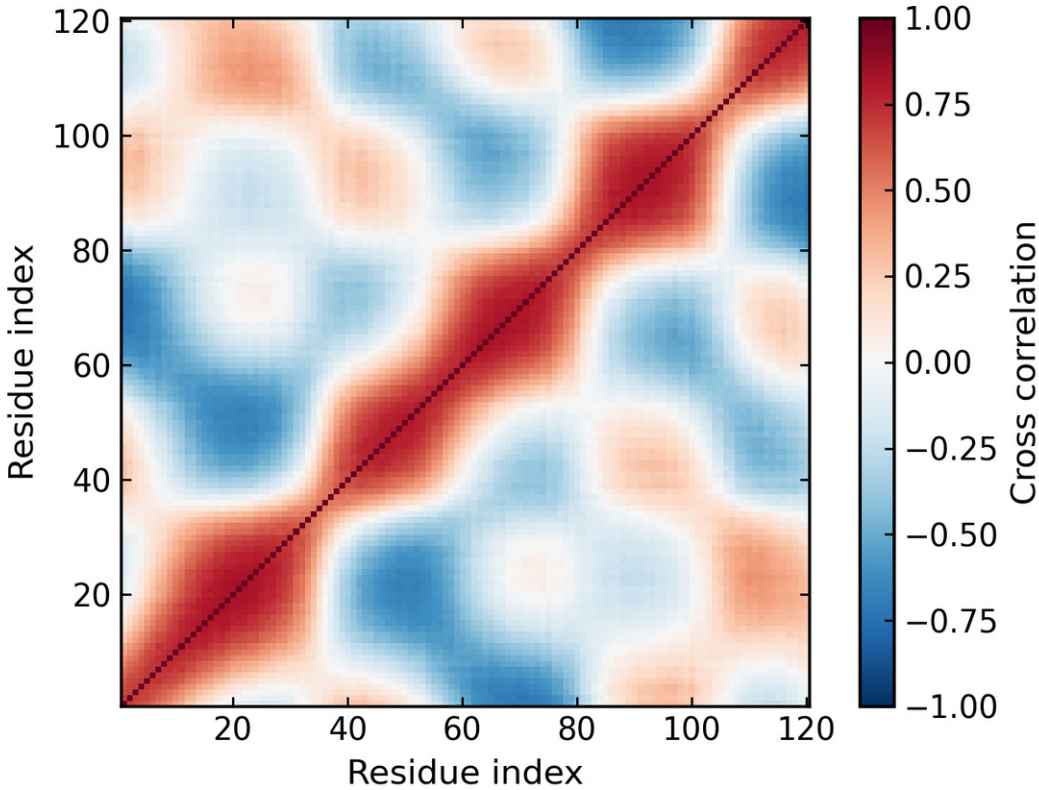
Nat. Commun. 2024, 15, 2638. Fig. 2a

DOI: 10.1038/s41467-024-46881-w

图227 示例数据

动态交叉相关矩阵

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以对称矩阵展示不同位置之间的相关关系，使用双向色阶区分**同向变化**、**反向变化**与**弱相关区域**。适合组织协同运动或变量关联的空间模式；相关性需要结合结构与其他证据解释。

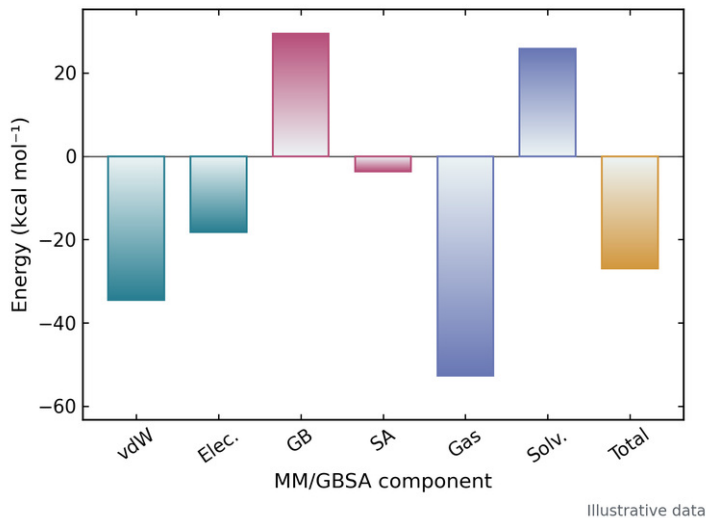
独立示例数据

画法参考：相关矩阵中正、负及接近零相关的色阶表达
Nat. Commun. 2026, 17, 6552. Fig. 4b,f
DOI: [10.1038/s41467-026-72663-7](https://doi.org/10.1038/s41467-026-72663-7)

图010 示例数据

MM/GBSA能量分解

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



将结合能估计拆分为气相相互作用与溶剂化分量，同时展示合计关系。柱形方向和大小突出**有利与不利贡献之间的抵消**，便于对照不同组分的作用；本例合计不含构象熵项。

独立示例数据

画法参考：能量分解、贡献符号和柱形幅度的比较表达

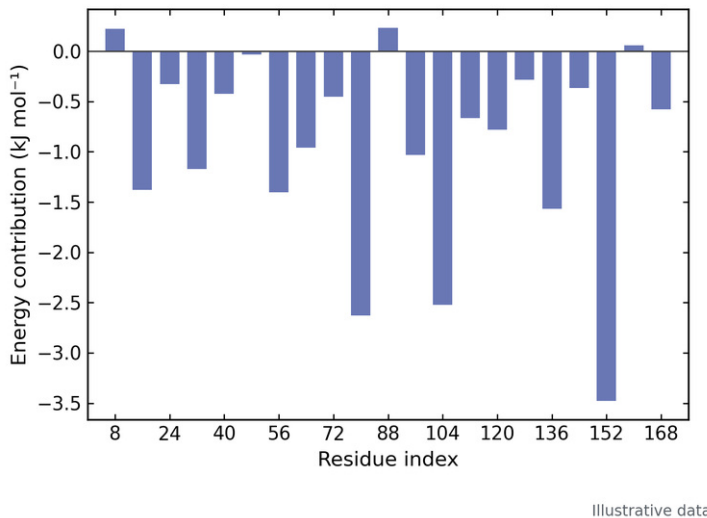
Nat. Commun. 2024, 15, 2638. Fig. 2a

DOI: 10.1038/s41467-024-46881-w

图225 示例数据

逐残基结合能贡献

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



沿残基索引展示能量分解贡献，以正负方向和幅度突出**潜在关键位点及局部作用差异**。可与口袋结构和接触信息配合，分析主要贡献区域；分解贡献需要在一致方法与参考定义下比较。

独立示例数据

画法参考：逐残基能量分解与贡献符号表达

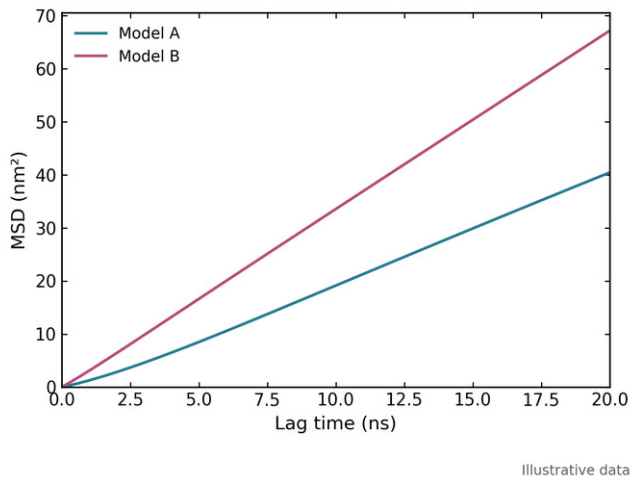
Nat. Commun. 2024, 15, 2638. Fig. 2a,b

DOI: 10.1038/s41467-024-46881-w

图008 示例数据

均方位移与扩散行为

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



重复图已归并；原编号：图008、图223。

以均方位移展示粒子运动随滞后时间的累积，比较不同条件下的**运动幅度与增长形状**。原尺度用于观察绝对差异，归一化表达用于区分曲线形态；扩散分析还需识别适宜的线性区间。

独立示例数据

应用参考：由MSD分析扩散运动及扩散参数

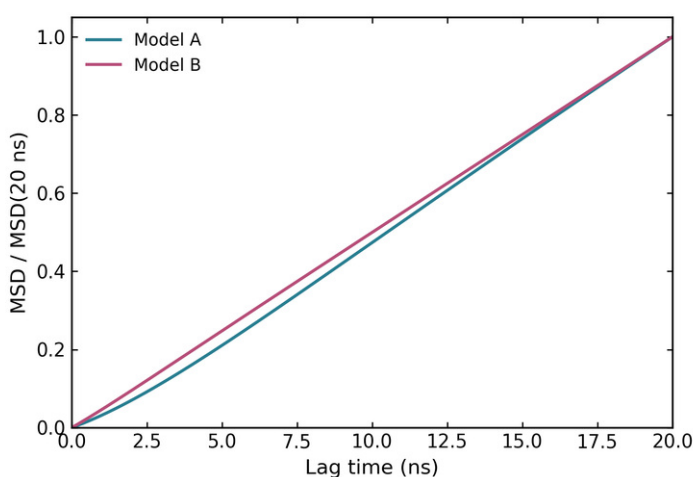
Nat. Commun. 2025, 16, 7404.

DOI: 10.1038/s41467-025-62664-3

图046 示例数据

归一化MSD与增长形状比较

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



以均方位移展示粒子运动随滞后时间的累积，比较不同条件下的**运动幅度与增长形状**。原尺度用于观察绝对差异，归一化表达用于区分曲线形态；扩散分析还需识别适宜的线性区间。

独立示例数据

应用参考：由MSD分析扩散运动及扩散参数

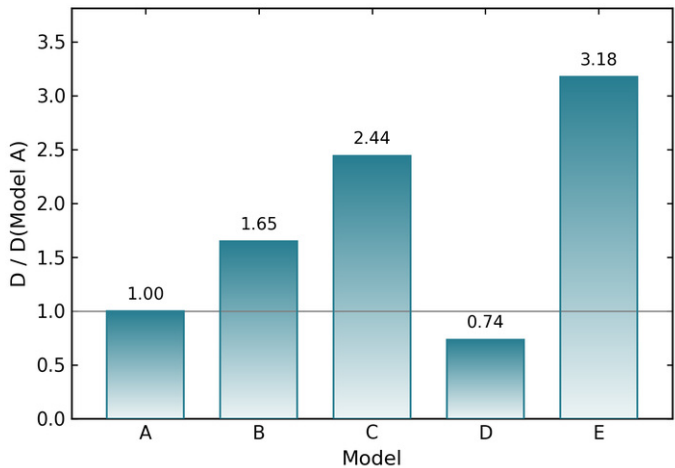
Nat. Commun. 2025, 16, 7404.

DOI: 10.1038/s41467-025-62664-3

图099 示例数据

扩散参数相对基准的比较

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以柱状图对比不同条件下的扩散参数，便于识别**传输能力的相对变化**。绝对数值表达保留参数量纲，相对基准表达强调变化倍数，可用于展示组分、环境或模型条件对输运行为的影响。

独立示例数据

应用参考：扩散系数与条件变化的对比

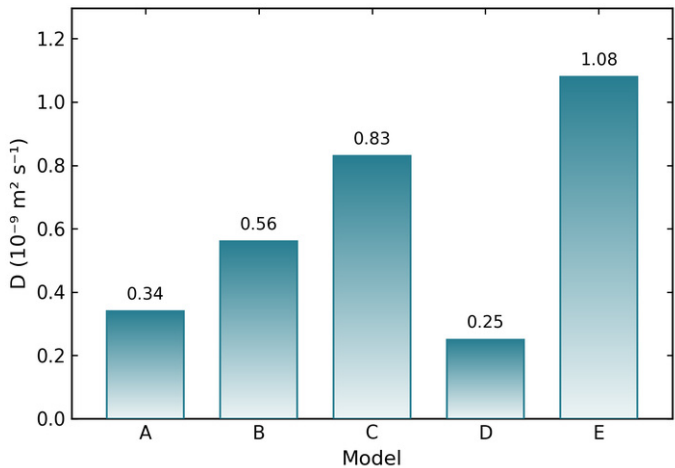
Nat. Commun. 2025, 16, 7404. Fig. 4a,b; Fig. 5b,g

DOI: 10.1038/s41467-025-62664-3

图244 示例数据

扩散系数柱状对比

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以柱状图对比不同条件下的扩散参数，便于识别**传输能力的相对变化**。绝对数值表达保留参数量纲，相对基准表达强调变化倍数，可用于展示组分、环境或模型条件对输运行为的影响。

独立示例数据

应用参考：扩散系数与条件变化的对比

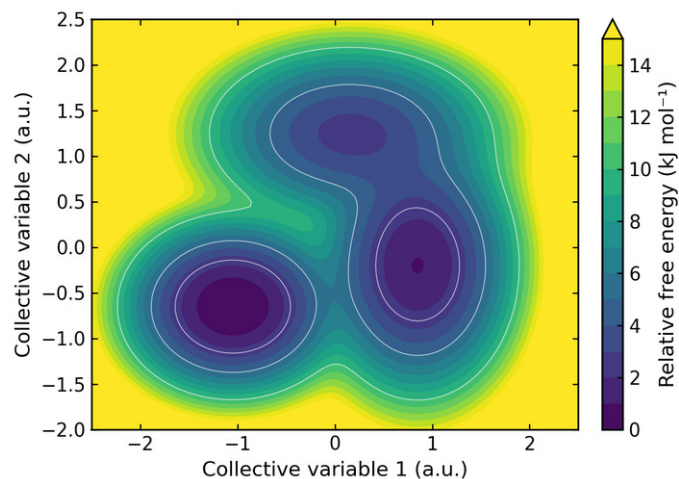
Nat. Commun. 2025, 16, 7404. Fig. 4a,b; Fig. 5b,g

DOI: 10.1038/s41467-025-62664-3

图009 示例数据

二维自由能景观

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

将构象空间投影到两个集体变量，以颜色或曲面高度展示**相对低能区及区域间分隔**。二维表达便于定位与比较分布，三维表达增强地形直观性；坐标含义和能量参考需在实际应用中明确。

独立示例数据

应用参考：二维构象自由能、能谷与代表状态的关联

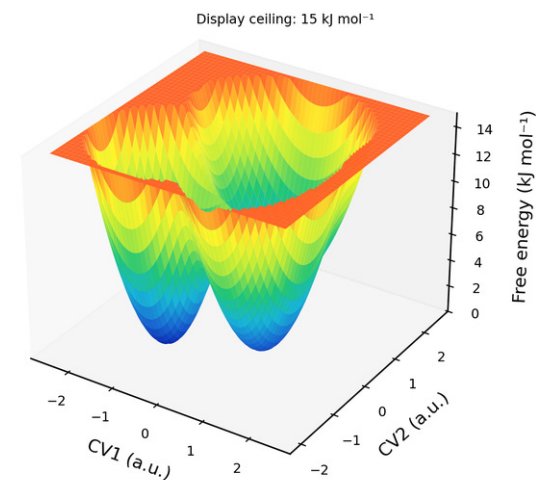
Nat. Commun. 2023, 14, 5739. Fig. 3; Fig. 4a

DOI: 10.1038/s41467-023-41343-1

图219 示例数据

三维自由能景观

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

将构象空间投影到两个集体变量，以颜色或曲面高度展示**相对低能区及区域间分隔**。二维表达便于定位与比较分布，三维表达增强地形直观性；坐标含义和能量参考需在实际应用中明确。

独立示例数据

应用参考：二维构象自由能、能谷与代表状态的关联

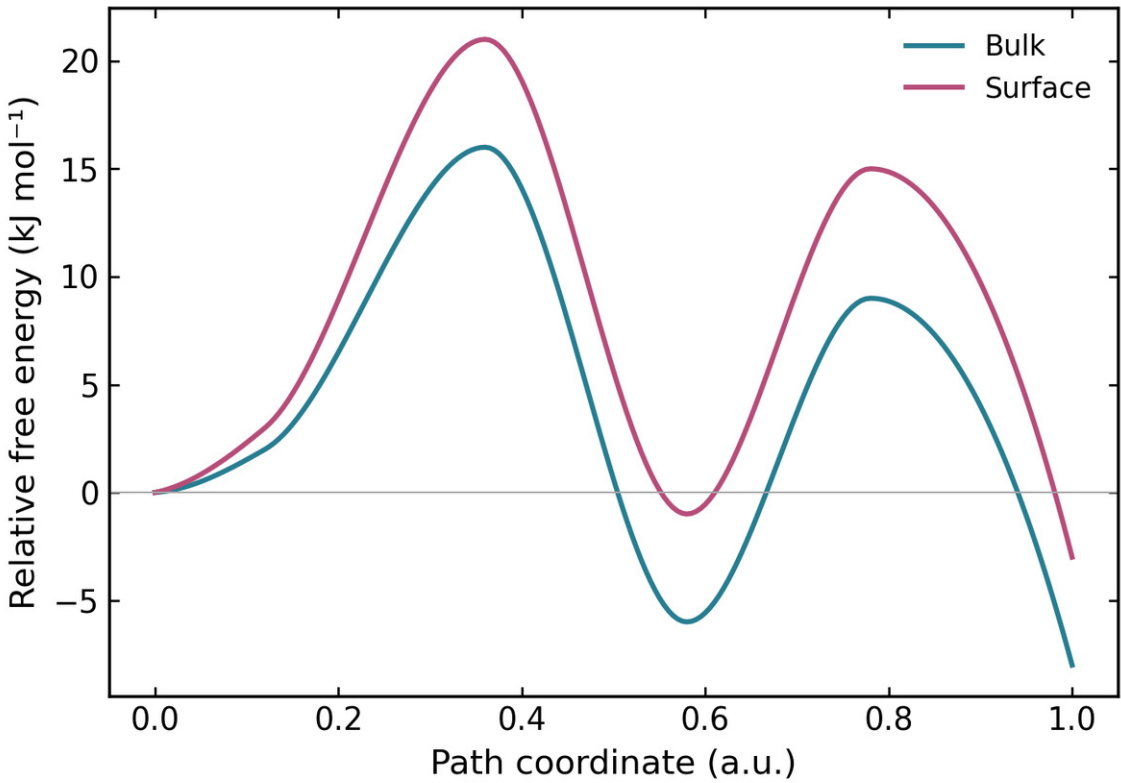
Nat. Commun. 2023, 14, 5739. Fig. 3; Fig. 4a

DOI: 10.1038/s41467-023-41343-1

图220 示例数据

沿路径的自由能变化

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

沿统一路径坐标展示相对自由能剖面，比较不同环境下的**局部极小值与势垒差异**。曲线可用于组织路径上的关键状态和阶段，但路径坐标本身不等同于真实时间或动力学速率。

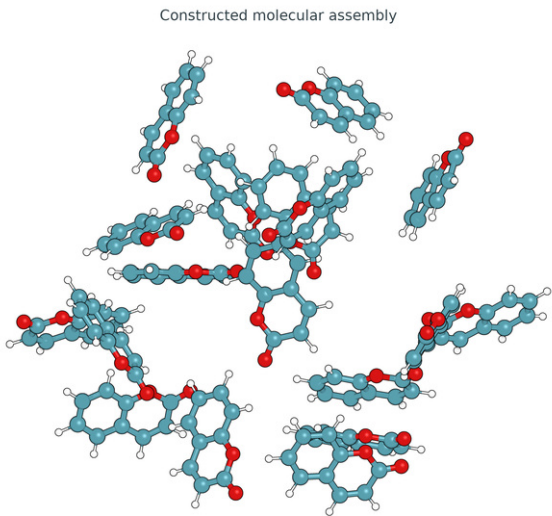
独立示例数据

画法参考：沿路径自由能剖面的局部极小值与势垒比较
Nat. Commun. 2018, 9, 4949. Fig. 1, bottom panel; Fig. 3, bottom panel
DOI: [10.1038/s41467-018-07320-9](https://doi.org/10.1038/s41467-018-07320-9)

图091 独立建模

分子集合的空间排布示意

空间排布 · 装配示意



用多个独立小分子构造空间集合，展示**分子朝向、疏密与遮挡关系**的表达方式。球棍模型保留每个分子的内部结构，整体视图适合说明多分子构型的组织方式；本例为教学装配模型。

Constructed molecular assembly

应用参考：聚集体系快照与空间结构组织

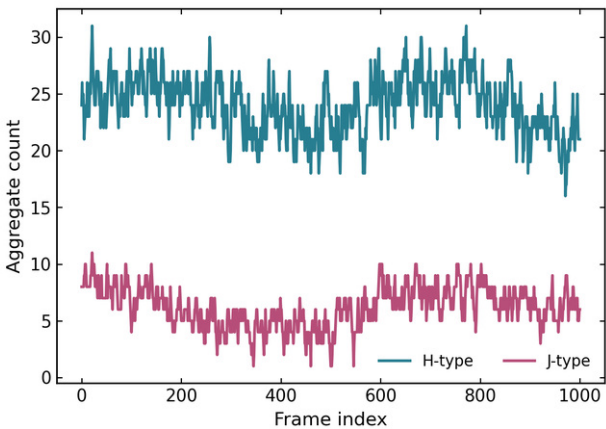
Nat. Commun. 2025, 16, 2407. Fig. 3a

DOI: 10.1038/s41467-025-57772-z

图048 示例数据

聚集类型随时间的变化

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

重复图已归并；原编号：图048、图229。

通过逐帧计数和经验累计分布比较不同聚集类型的变化。曲线保留**时间顺序与波动特征**，累计分布概括常见计数范围，适合共同展示聚集过程和总体分布，而非用单一平均值代替全部行为。

独立示例数据

应用参考：聚集度和聚集倾向统计比较

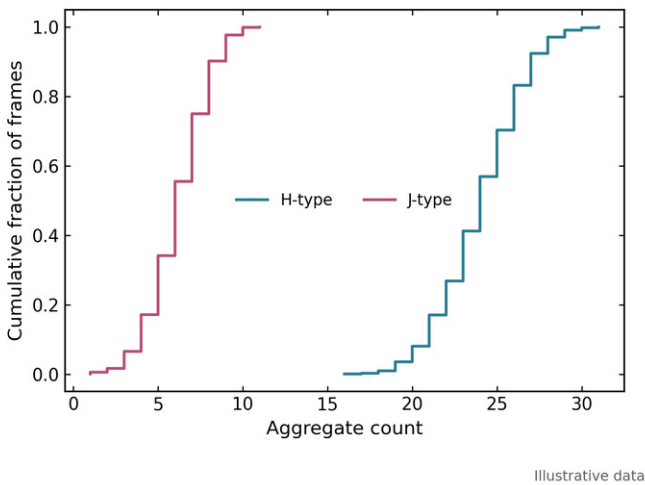
Nat. Commun. 2025, 16, 2407. Fig. 3b

DOI: 10.1038/s41467-025-57772-z

图101 示例数据

聚集计数的经验累计分布

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



通过逐帧计数和经验累计分布比较不同聚集类型的变化。曲线保留**时间顺序与波动特征**，累计分布概括常见计数范围，适合共同展示聚集过程和总体分布，而非用单一平均值代替全部行为。

独立示例数据

画法参考：经验累积分布比较连续或离散数值

Nat. Commun. 2018, 9, 171. Fig. 7a-c

DOI: [10.1038/s41467-017-02213-9](https://doi.org/10.1038/s41467-017-02213-9)

应用参考：聚集度和聚集倾向统计比较

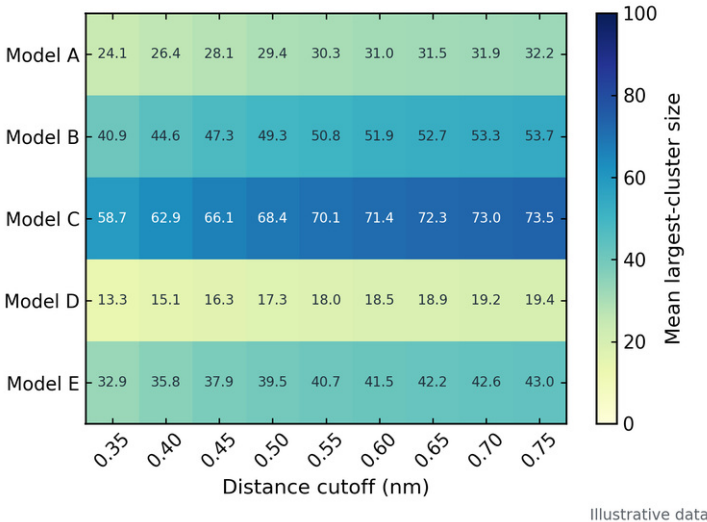
Nat. Commun. 2025, 16, 2407. Fig. 3b

DOI: [10.1038/s41467-025-57772-z](https://doi.org/10.1038/s41467-025-57772-z)

图230 示例数据

最大簇大小的阈值敏感性

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



将距离判据与模型条件组成矩阵，比较最大簇大小对分析阈值的敏感性。连续色阶和数值共同突出**稳定区域及阈值依赖**，可辅助判断聚集结论是否依赖某个特定的几何定义。

独立示例数据

画法参考：参数阈值敏感性与聚类稳定性的热图表达

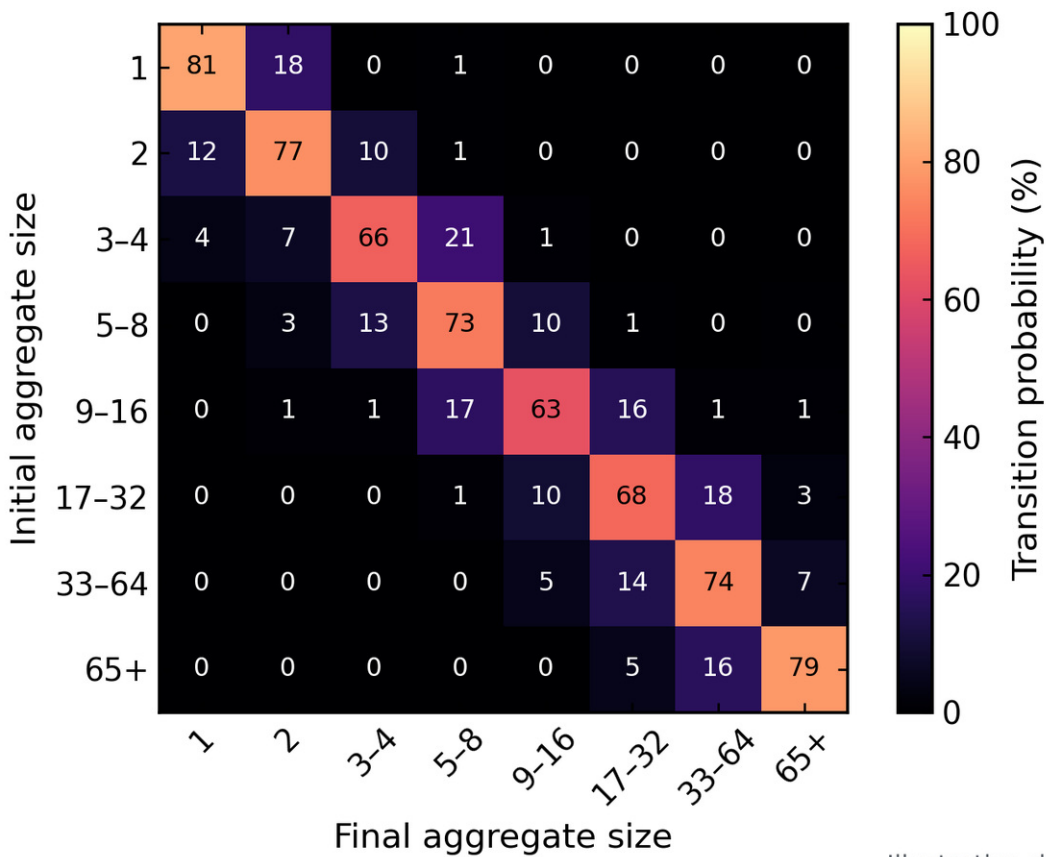
Nat. Commun. 2021, 12, 764. Fig. 7a,b

DOI: [10.1038/s41467-020-20885-8](https://doi.org/10.1038/s41467-020-20885-8)

图221 示例数据

聚集尺寸的状态转移矩阵

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



Illustrative data

以状态转移矩阵展示不同聚集尺寸之间的条件转移概率，突出**状态保持、增长与解聚方向**。行归一化使每个初始状态的去向可独立比较，色阶与数值共同展示主要转移通道。

独立示例数据

画法参考：聚集尺寸的条件状态转移概率矩阵

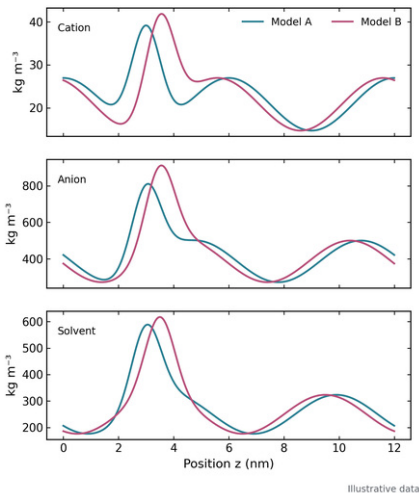
Nat. Commun. 2018, 9, 696. Fig. 2c

DOI: [10.1038/s41467-017-02625-7](https://doi.org/10.1038/s41467-017-02625-7)

图245 示例数据

不同组分的质量密度分布

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



本卡含 2 个展示版本；原编号：图245、图049。

沿共同空间坐标展示不同组分的质量密度，可观察**富集区域**、**界面宽度及组分分层**。单组分对比突出条件差异，分面表达使多个组分保留各自数值尺度，同时便于对照相同空间位置。

独立示例数据

应用参考：沿空间坐标的界面组分密度分布

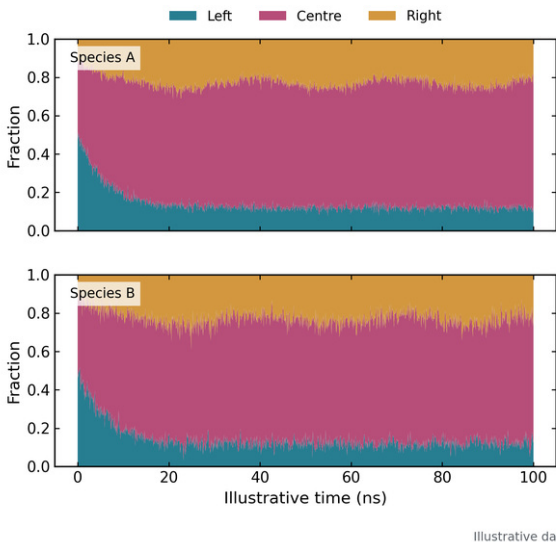
Nat. Commun. 2022, 13, 2029. Fig. 5a,b

DOI: 10.1038/s41467-022-29761-z

图102 示例数据

不同空间区域的粒子比例

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



将空间划分为不同区域，展示区域粒子数及其占总数的比例。绝对计数描述**粒子迁移与区域容量**，比例表达突出相对分配，两者配合可区分总量变化与空间再分布。

独立示例数据

应用参考：指定界面区域中离子与溶剂数密度比较

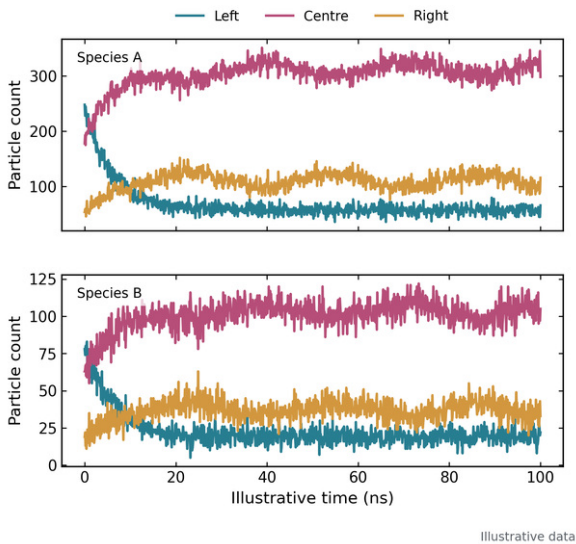
Nat. Commun. 2022, 13, 2029. Fig. 5c,d

DOI: 10.1038/s41467-022-29761-z

图247 示例数据

不同区域的粒子计数曲线

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



将空间划分为不同区域，展示区域粒子数及其占总数的比例。绝对计数描述**粒子迁移与区域容量**，比例表达突出相对分配，两者配合可区分总量变化与空间再分布。

独立示例数据

应用参考：指定界面区域中离子与溶剂数密度比较

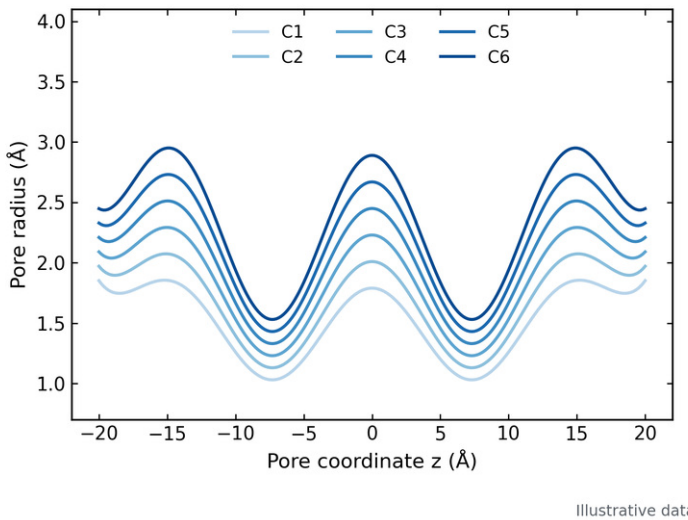
Nat. Commun. 2022, 13, 2029. Fig. 5c,d

DOI: 10.1038/s41467-022-29761-z

图217 示例数据

孔道半径的构象剖面

独立示例 · 数值表达 · 对比分析



沿孔道轴向比较不同构象的局部半径，突出**狭窄区域、宽腔及构象变化**。共同坐标和一致量纲便于识别限制通行的瓶颈，并辅助对照结构位置与通道开放程度。

独立示例数据

画法参考：不同构象沿孔道通路的半径剖面

Nature 2024, 628, 910-918. Extended Data Fig. 5j; Extended Data Fig. 8c

DOI: 10.1038/s41586-024-07256-9

配色01 示例配色

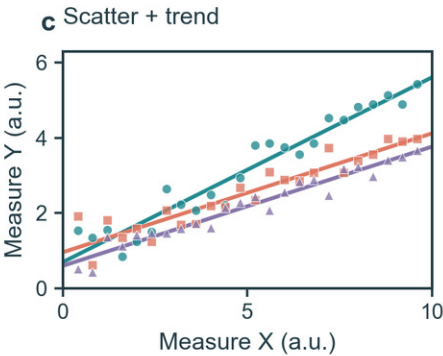
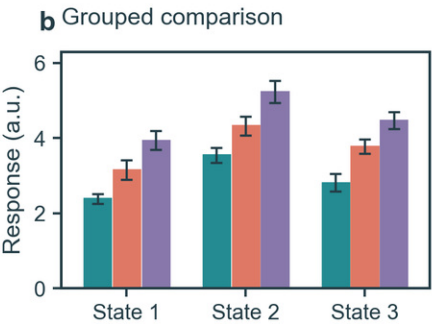
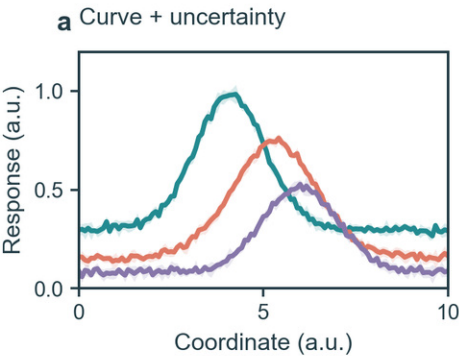
青绿—珊瑚

配色 · 多组对比 · 双向色阶

01 / Teal / Coral

Same data. Same scales. Different visual language.

Model A Model B Model C



Illustrative data | Curve / bars: mean $\pm$ SD, n = 6 synthetic replicates

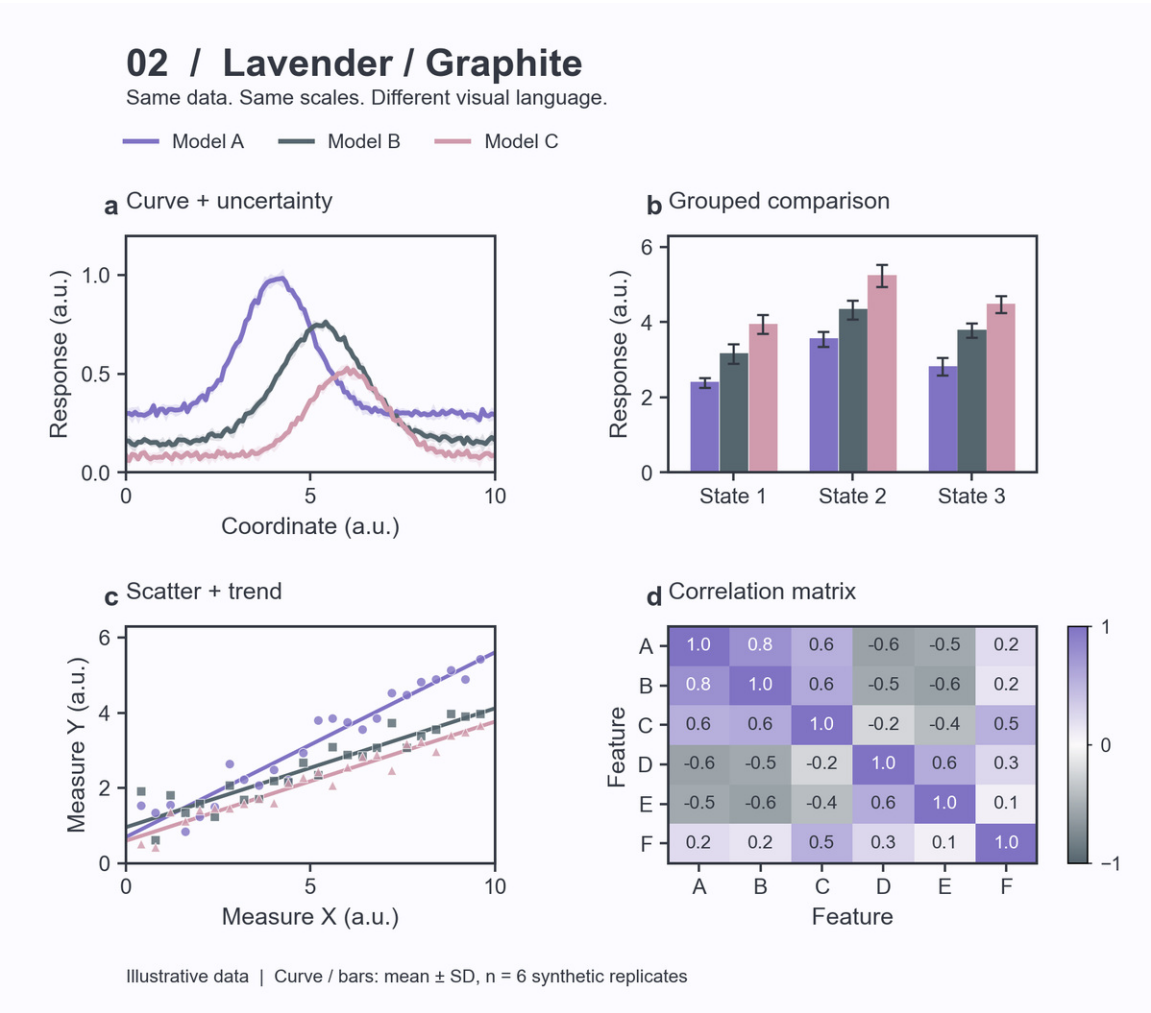
以同一套独立示例数据展示曲线、分组柱、散点回归及
相关矩阵，便于比较配色在不同表达中的辨识度。
系列颜色与坐标尺度保持一致，曲线和柱图同时呈现
合成重复的离散程度，相关矩阵使用以零为中心的双
向色阶。

示例数据；曲线与柱图为均值 $\pm$ 样本SD（6个合成重复）。

配色03 示例配色

雾紫—石墨

配色 · 多组对比 · 双向色阶



以同一套独立示例数据展示曲线、分组柱、散点回归及
相关矩阵，便于比较配色在不同表达中的辨识度。
系列颜色与坐标尺度保持一致，曲线和柱图同时呈现
合成重复的离散程度，相关矩阵使用以零为中心的双
向色阶。

示例数据；曲线与柱图为均值 $\pm$ 样本SD（6个合成重复）。

配色04 示例配色

湖蓝—琥珀

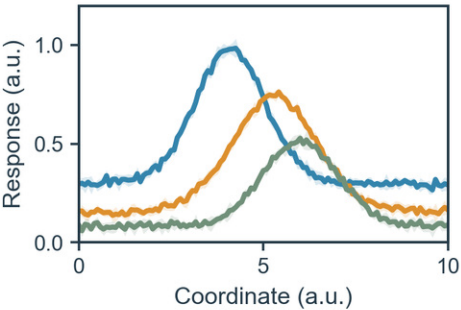
配色 · 多组对比 · 双向色阶

03 / Lake / Amber

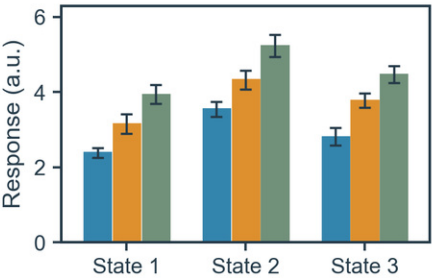
Same data. Same scales. Different visual language.

Model A Model B Model C

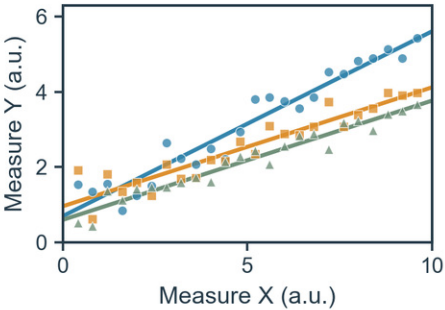
a Curve + uncertainty



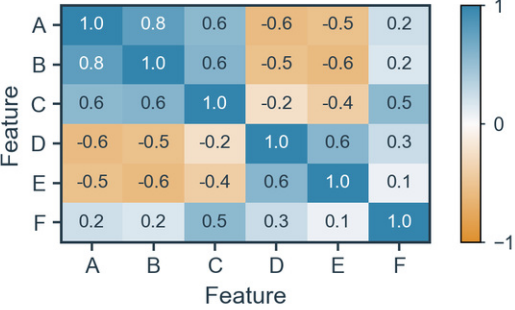
b Grouped comparison



c Scatter + trend



d Correlation matrix



Illustrative data | Curve / bars: mean $\pm$ SD, n = 6 synthetic replicates

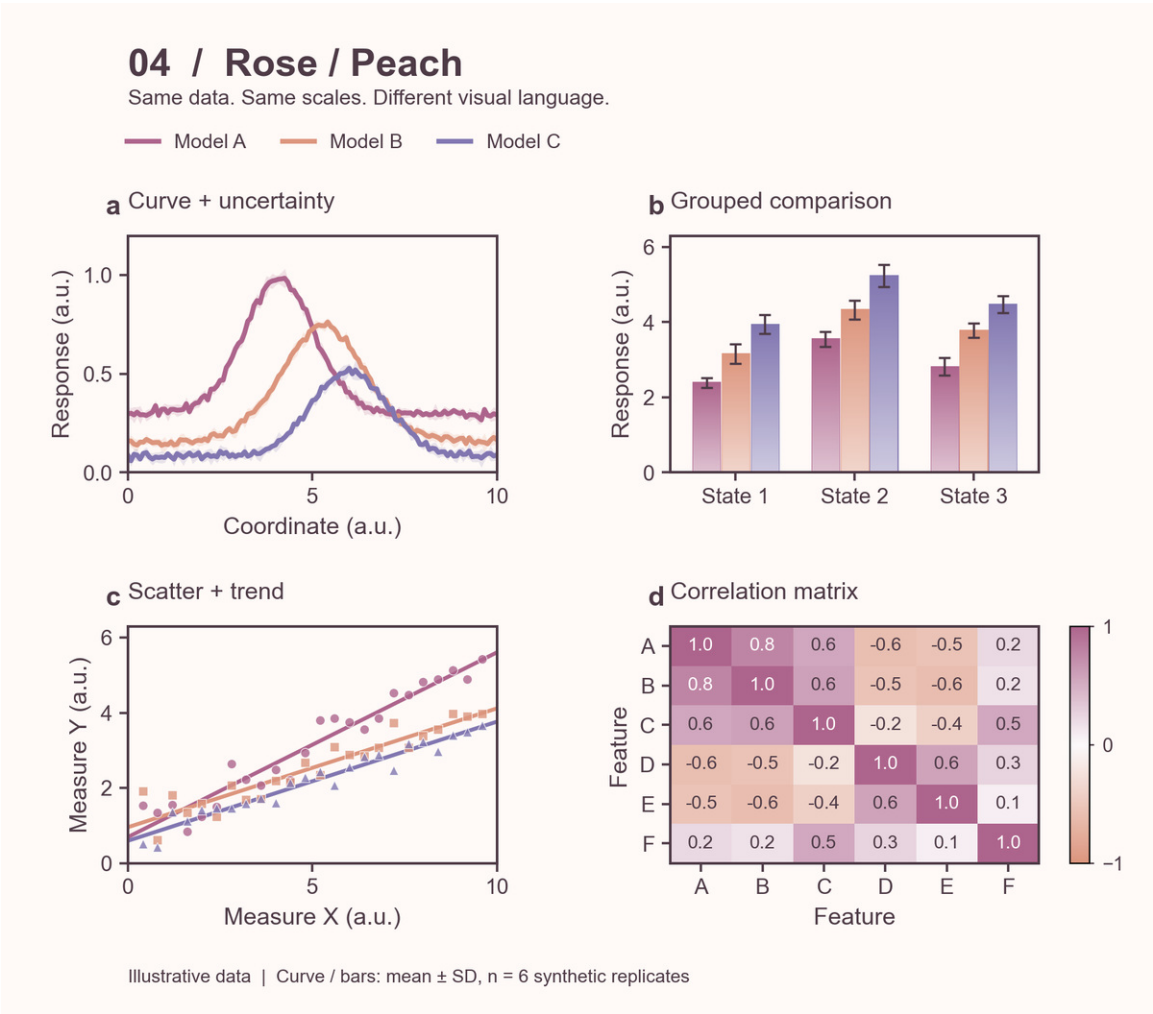
以同一套独立示例数据展示曲线、分组柱、散点回归及
相关矩阵，便于比较配色在不同表达中的辨识度。
系列颜色与坐标尺度保持一致，曲线和柱图同时呈现
合成重复的离散程度，相关矩阵使用以零为中心的双
向色阶。

示例数据；曲线与柱图为均值 $\pm$ 样本SD（6个合成重复）。

配色05 示例配色

玫瑰—蜜桃

配色 · 多组对比 · 双向色阶



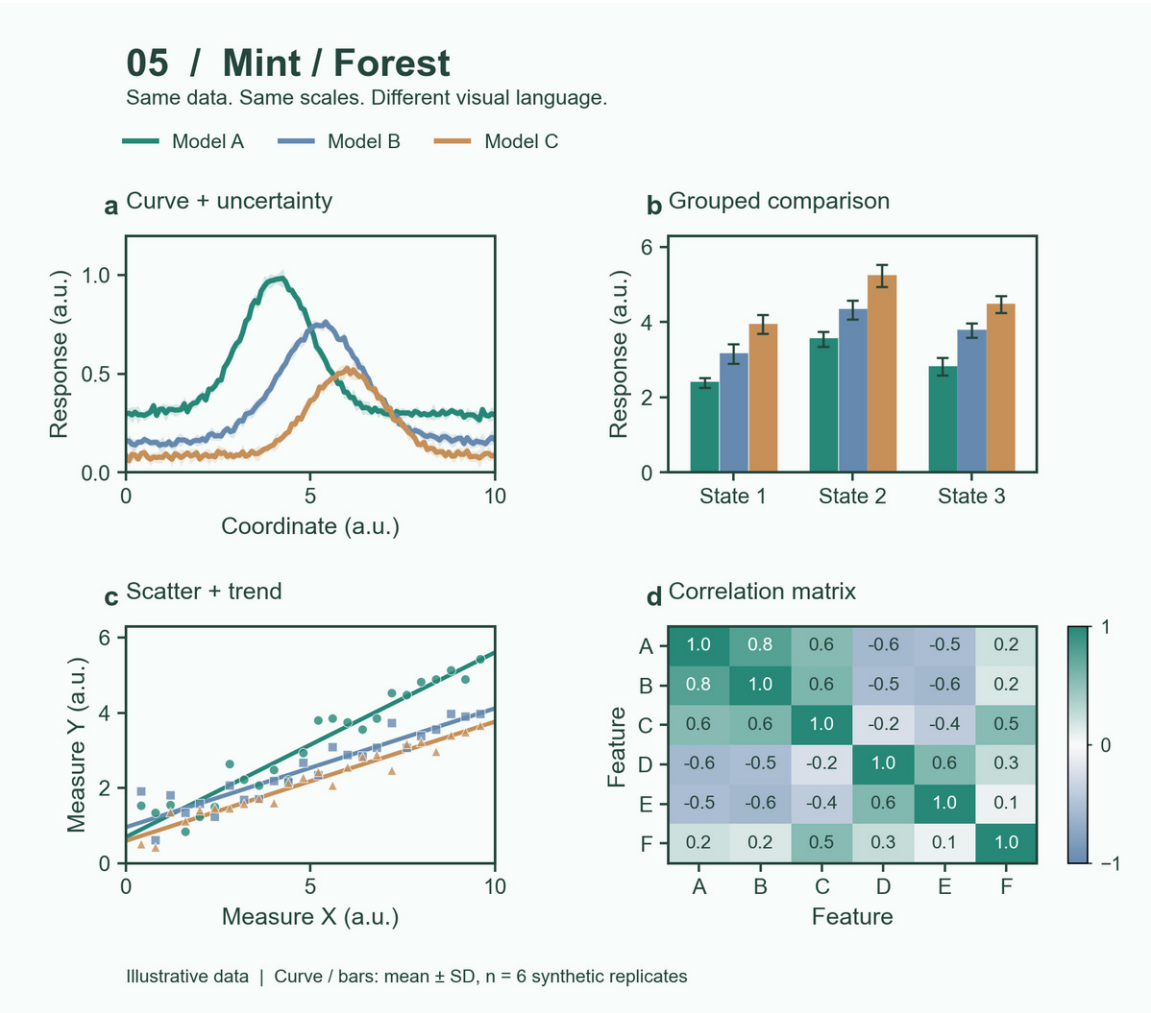
以同一套独立示例数据展示曲线、分组柱、散点回归及
相关矩阵，便于比较配色在不同表达中的辨识度。
系列颜色与坐标尺度保持一致，曲线和柱图同时呈现
合成重复的离散程度，相关矩阵使用以零为中心的双
向色阶。

示例数据；曲线与柱图为均值 $\pm$ 样本SD（6个合成重复）。

配色06 示例配色

薄荷—森林

配色 · 多组对比 · 双向色阶



以同一套独立示例数据展示曲线、分组柱、散点回归及
相关矩阵，便于比较配色在不同表达中的辨识度。
系列颜色与坐标尺度保持一致，曲线和柱图同时呈现
合成重复的离散程度，相关矩阵使用以零为中心的双
向色阶。

示例数据；曲线与柱图为均值 $\pm$ 样本SD（6个合成重复）。

配色02 示例配色

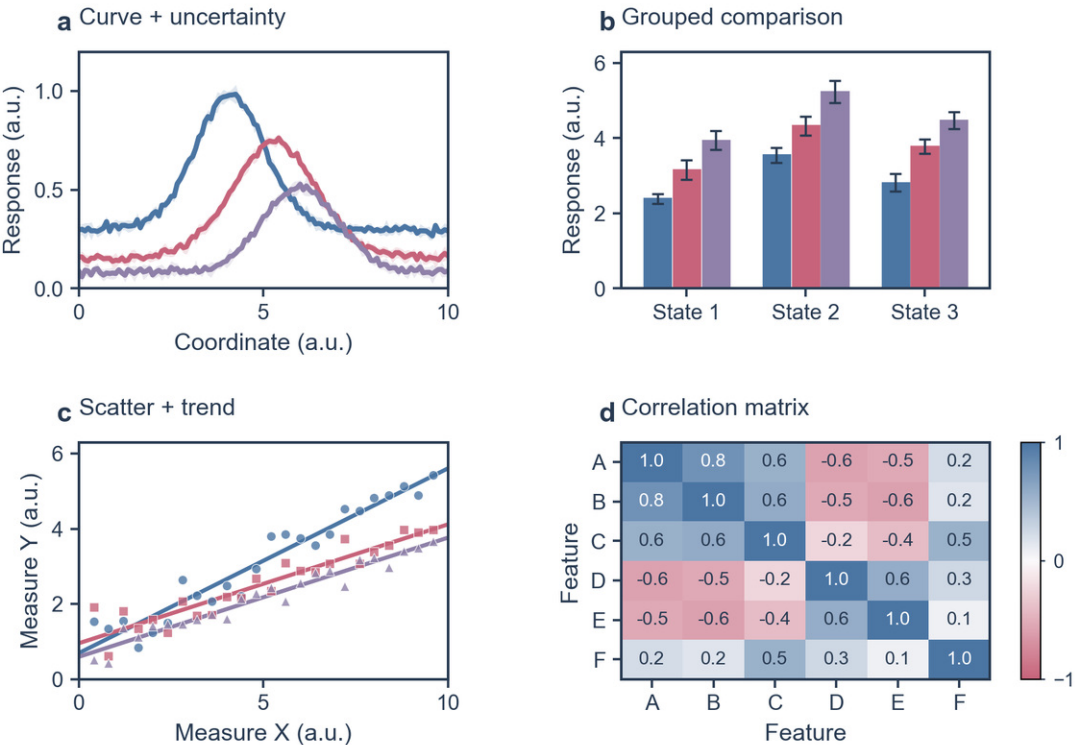
靛蓝—蔷薇

配色 · 多组对比 · 双向色阶

06 / Indigo / Rose

Same data. Same scales. Different visual language.

Model A Model B Model C



Illustrative data | Curve / bars: mean $\pm$ SD, n = 6 synthetic replicates

以同一套独立示例数据展示曲线、分组柱、散点回归及
相关矩阵，便于比较配色在不同表达中的辨识度。
系列颜色与坐标尺度保持一致，曲线和柱图同时呈现
合成重复的离散程度，相关矩阵使用以零为中心的双
向色阶。

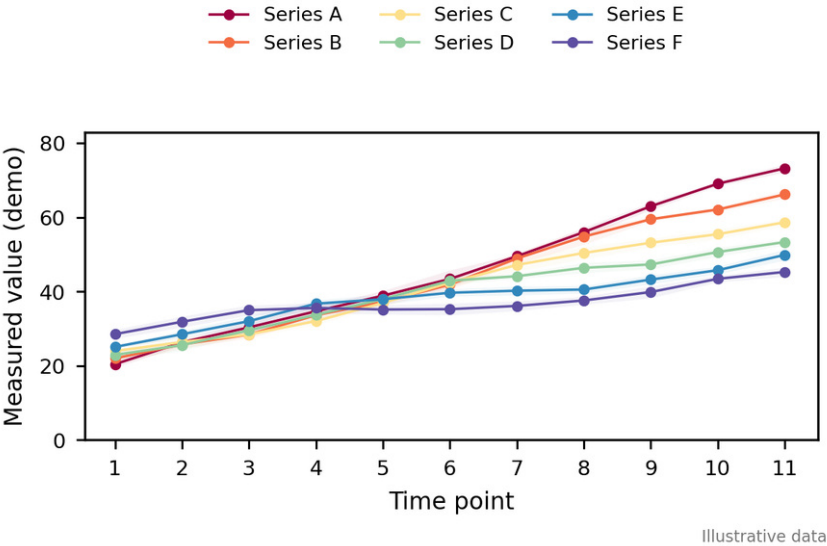
示例数据；曲线与柱图为均值 $\pm$ 样本SD（6个合成重复）。

曲线与时间序列

图104 示例数据

时间曲线与标准差带

时间趋势 · 标准差带 · 多组比较



用折线表示各时间点的均值，并用淡色带标出标准差，可同时比较不同组的变化趋势与数据离散程度。**均值轨迹、组间差异和波动范围**在同一坐标中直接对应，适合多条件的时间响应或过程数据展示，图例与带宽定义使各组数据及其统计含义清楚可辨。

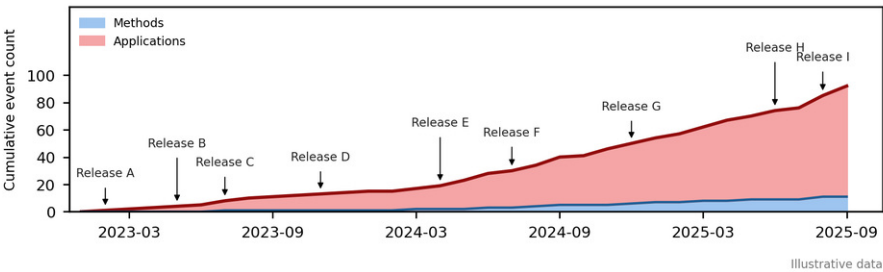
Illustrative data; 误差表示样本SD。

画法参考：时间均值曲线与标准差阴影带
Nat. Commun. 2018, 9, 5179. Fig. 1b-c
DOI: 10.1038/s41467-018-07346-z

图260 示例数据

累计数量与事件时间线

累计曲线 · 时间线 · 分项组成



沿时间展示不同类别的累计数量，用堆叠填色与事件标记组织变化过程，突出**总体增长、类别贡献和关键节点附近的变化**。适合文献统计、任务累计或阶段成果整理；累计口径与事件日期对应清楚，可帮助比较不同阶段的增长节奏。

Illustrative data

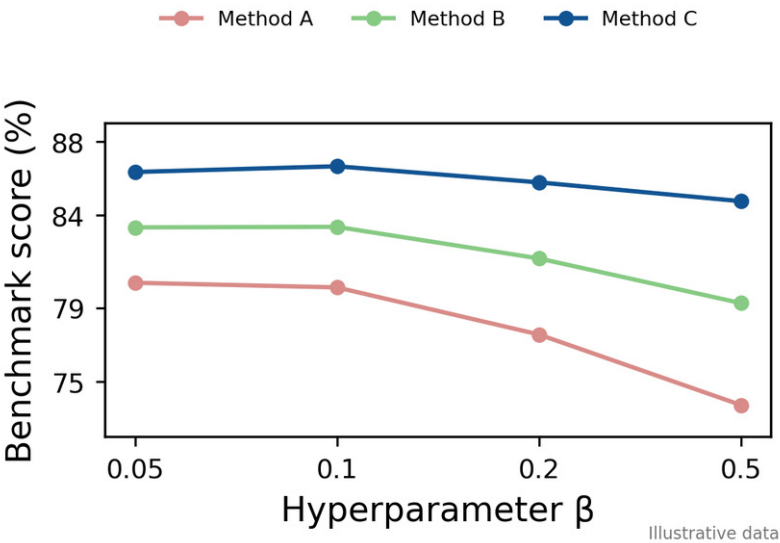
画法参考：累计发现数量随时间的变化
Nature 2023, 624, 80-85. Fig. 1b
DOI: 10.1038/s41586-023-06735-9

曲线与时间序列

图261 示例数据

参数变化与模型响应

参数敏感 · 模型对比 · 响应曲线



将评价指标随参数变化的响应画为带标记曲线，突出**稳定区间、峰值位置与不同方法的敏感程度**。适合超参数、模型权重或控制条件的比较，可帮助选择后续重点测试的区间；保留参数的实际取值和相邻点的对应关系。

Illustrative data

应用参考：改变组分或热历史后模型预测分布响应

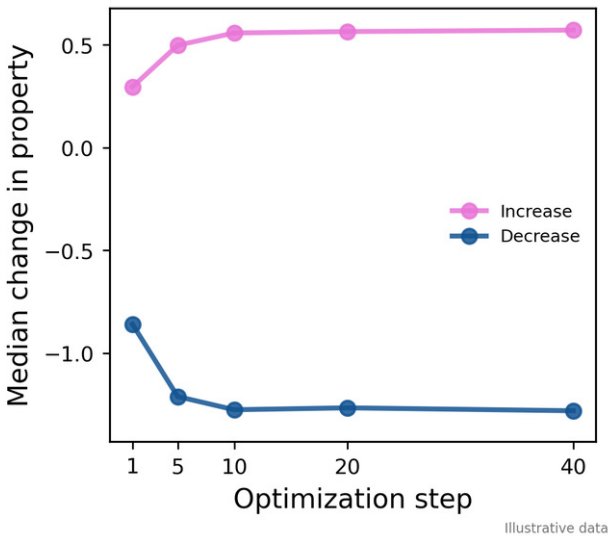
Nat. Commun. 2019, 10, 5537. Fig. 3f

DOI: 10.1038/s41467-019-13511-9

图262 示例数据

优化过程与性质收敛

优化轨迹 · 中位数 · 性质变化



沿优化步数展示不同目标的性质变化，以离散标记和连线呈现整体收敛趋势，突出**初期变化速度、趋稳区间和目标间差异**。适合比较优化策略或多目标过程，可结合终值和重复结果判断改善程度，并为计算过程的选择提供依据。

Illustrative data

应用参考：自主搜索实验中性质随迭代改善

Nature 2020, 583, 237-241. Fig. 3a

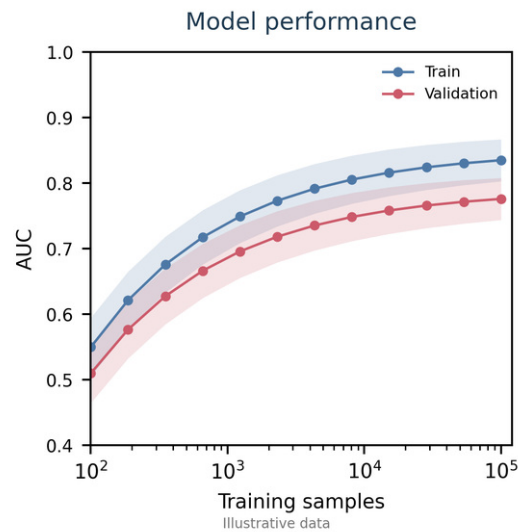
DOI: 10.1038/s41586-020-2442-2

曲线与时间序列

图269 示例数据

样本规模与学习曲线

学习曲线 · 样本规模 · 标准差



将训练和验证指标随样本规模的变化画为曲线，并用阴影带展示重复结果的离散度，突出**数据规模收益、性能趋稳及两类表现的差距**。适合评价数据需求和模型泛化表现，可结合实际采样设计讨论增加样本后可能改善的区间。

Illustrative data; 误差表示样本SD。

画法参考：训练样本数量与泛化/预测误差学习曲线

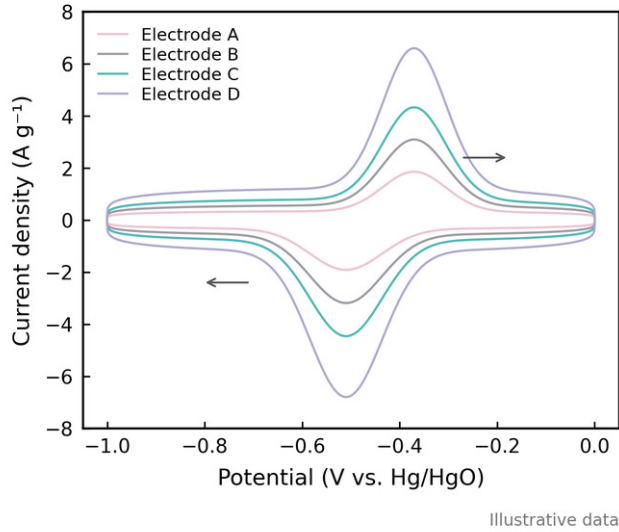
Nature 2023, 624, 80-85. Fig. 3a-c

DOI: 10.1038/s41586-023-06735-9

图204 示例数据

循环伏安响应曲线

循环伏安 · 电位扫描 · 电极对比



在同一电位范围内叠加不同电极的循环伏安曲线，通过扫描方向和正负电流轮廓展示**氧化还原响应与电极间差异**。一致的电位参照和电流单位便于横向比较，可与充放电、组成及结构结果配合组织电化学性能分析。

Illustrative data

应用参考：多条件循环伏安响应曲线比较

Nat. Commun. 2021, 12, 4967. Fig. 1f

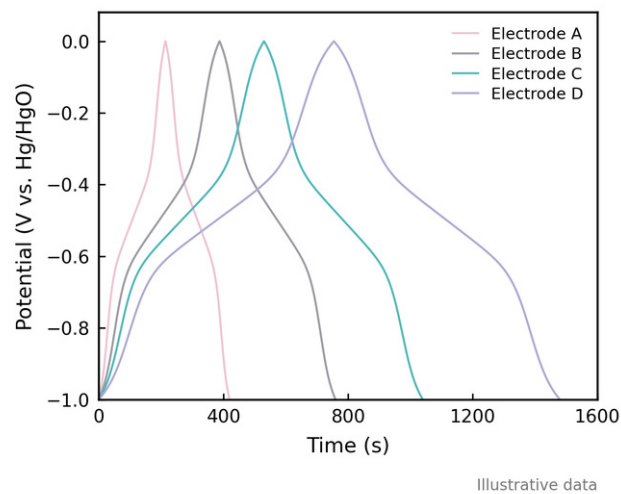
DOI: 10.1038/s41467-021-24863-6

曲线与时间序列

图205 示例数据

恒流充放电曲线

恒流充放电 · 时间响应 · 电极对比



沿时间轴对照不同电极的充放电电位轨迹，突出**充放电时长、平台区间及曲线形态**。共同电流条件与电位参照便于比较储能响应，可与循环伏安和循环性能结果配合，说明不同材料或处理条件产生的变化。

Illustrative data

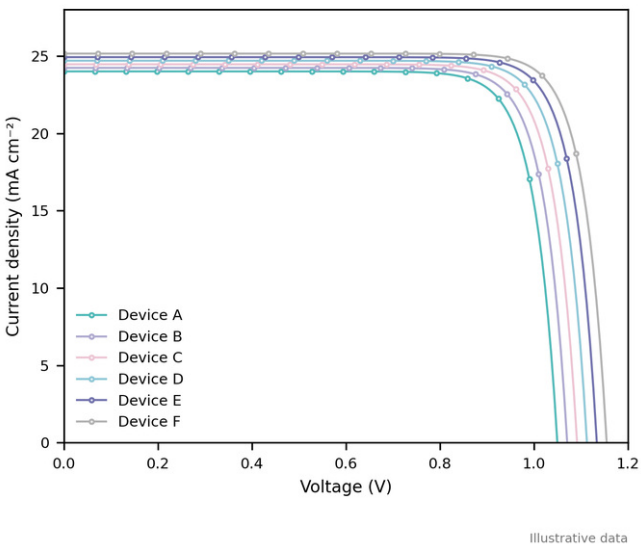
应用参考：实验和分子模拟恒流充放电电压曲线
Nat. Comput. Sci. 2021, 1, 725-731. Fig. 4a-b
DOI: [10.1038/s43588-021-00153-5](https://doi.org/10.1038/s43588-021-00153-5)

画法参考：相同外加电流下的充放电曲线
Nat. Commun. 2021, 12, 4967. Fig. 1g
DOI: [10.1038/s41467-021-24863-6](https://doi.org/10.1038/s41467-021-24863-6)

图190 示例数据

电流密度与电压响应

电流电压 · 条件对比 · 响应曲线



在共同电压范围内对照不同条件的电流密度曲线，突出**响应形态、拐点位置及端点差异**。颜色和空心标记区分各组，便于观察界面修饰或组成变化带来的电学响应，可与结构和载流子分析结果配合组织材料性能讨论。

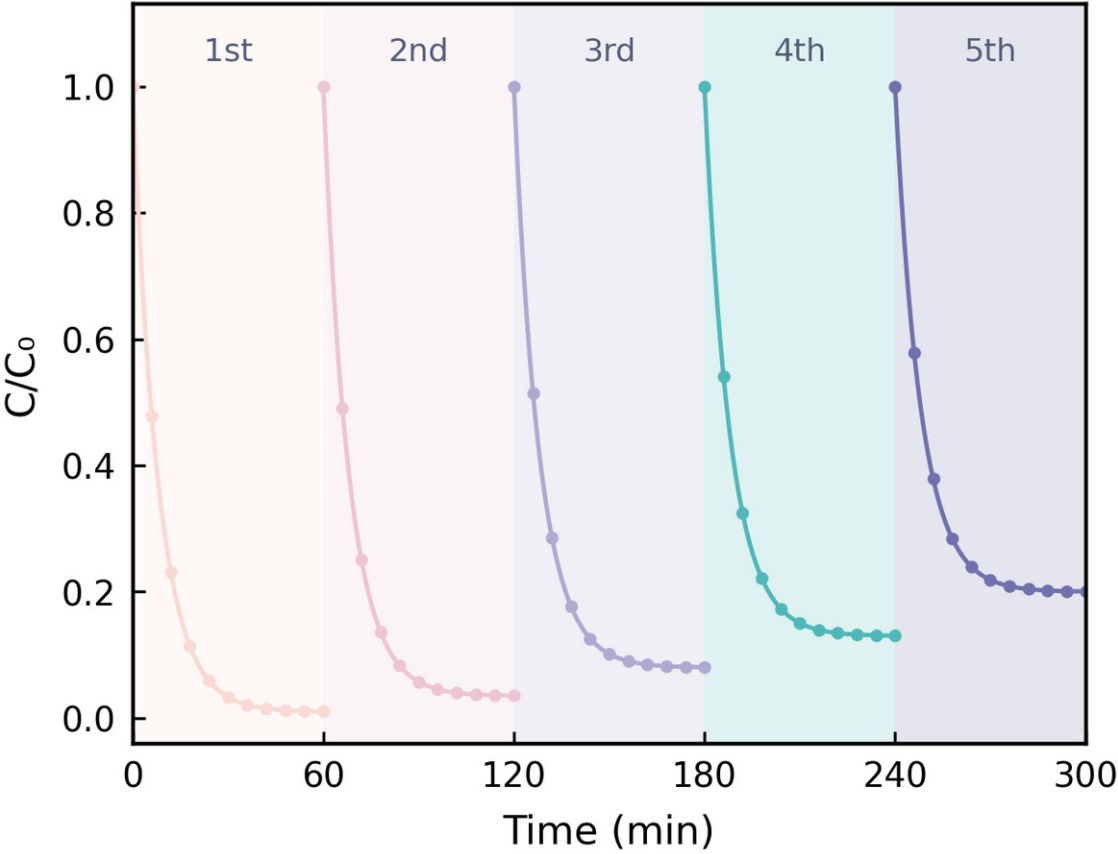
Illustrative data

应用参考：不同电解质条件下的电极极化响应
Nat. Commun. 2019, 10, 4913. Fig. 2c
DOI: [10.1038/s41467-019-12900-4](https://doi.org/10.1038/s41467-019-12900-4)

图206 示例数据

循环过程归一化浓度变化

浓度变化 · 循环过程 · 归一化



Illustrative data

按连续循环排列归一化浓度曲线，以分区色彩建立循环之间的对应，突出**单次衰减过程与循环间剩余水平变化**。共同归一化参照便于比较重复使用或处理条件的影响，可与时间尺度、吸附行为及再生过程结果联合分析。

Illustrative data

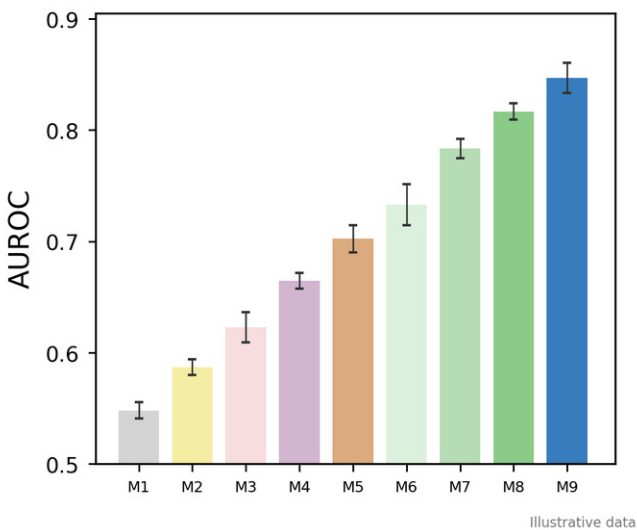
应用参考：吸附分离中的浓度/去除过程比较
Nat. Commun. 2022, 13, 4169. Fig. 3c-d
DOI: [10.1038/s41467-022-31575-y](https://doi.org/10.1038/s41467-022-31575-y)

柱状图与分类比较

图258 示例数据

分类性能均值与离散度

AUROC · 均值 · 标准差



以柱形比较不同方法的分类性能，并用误差线表示重复结果的离散程度，突出**平均表现与结果波动之间的关系**。适合模型基准或方法对照；保留性能指标的取值范围和柱形显示基线，结合误差定义解释不同方法的差异。

Illustrative data; 均值±样本SD, n=8; 纵轴起点0.5。

画法参考：多模型分类性能均值、标准差与重复观测

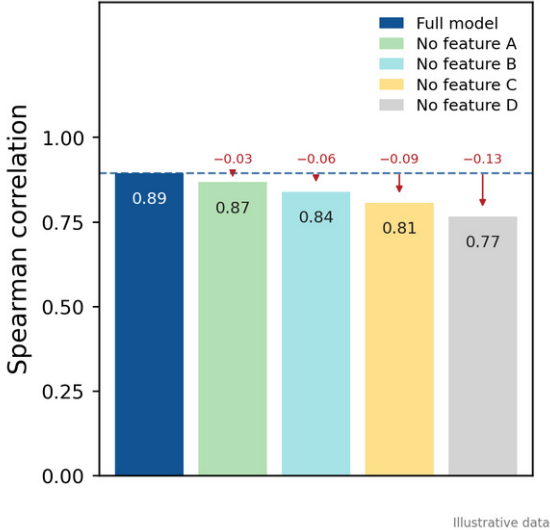
Nat. Commun. 2024, 15, 10849. Fig. 4c

DOI: 10.1038/s41467-024-55146-5

图259 示例数据

模块消融与性能变化

消融分析 · 相关系数 · 差值标注



将完整模型与各模块消融条件并列，用共同参考线和差值标注展示性能变化，突出**不同模块对整体表现的相对贡献**。适合模型设计和组合方法的比较，可与消融配置、评价指标和重复结果对应，帮助说明哪些组成对目标任务更敏感。

Illustrative data

画法参考：分组柱图展示模块消融后的性能变化

Nat. Commun. 2024, 15, 3063. Fig. 2c

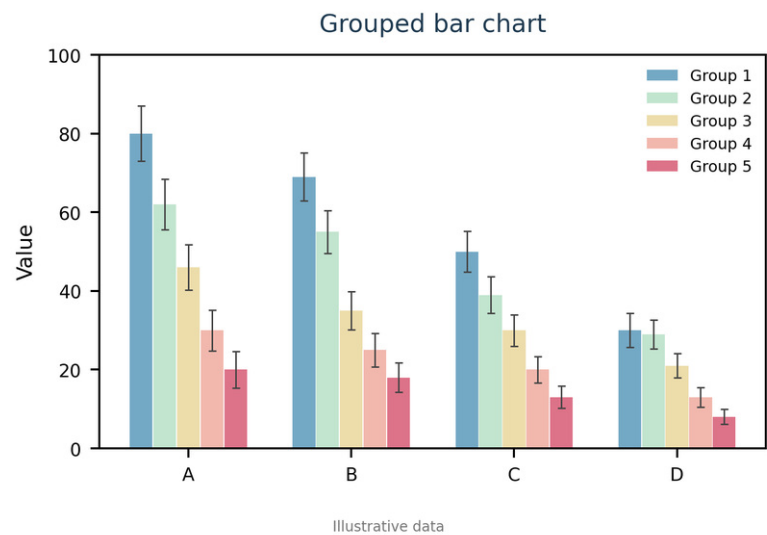
DOI: 10.1038/s41467-024-46764-0

柱状图与分类比较

图273 示例数据

分组均值与误差柱图

分组柱 · 均值 · 标准差



将不同类别内的各组均值并列，以统一颜色识别组别并用误差线表示离散程度，突出类别效应、组间差异与变化一致性。适合多条件指标比较，可与单个观测或分布图配合解释结果；组序和误差定义在各类别中保持一致。

Illustrative data；误差表示样本SD。

画法参考：分组柱图与重复测量标准差

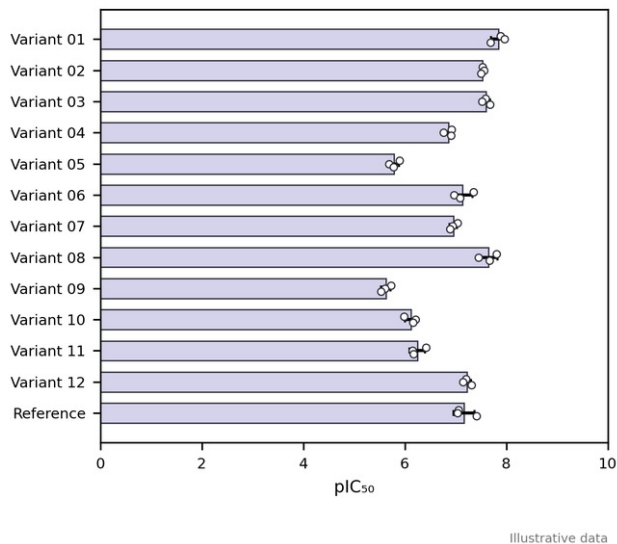
Nat. Commun. 2019, 10, 675. Fig. 3d

DOI: 10.1038/s41467-019-08644-w

图265 示例数据

不同模型活性与重复测量

活性比较 · 重复测量 · 误差线



通过横向柱、误差线及重复测量点比较不同模型的活性水平与组内离散程度。统一横轴便于识别活性差异，并保留各次重复的分布信息；适用于方案筛选及构效关系中的多对象比较。

Illustrative data；误差表示样本SD。

画法参考：测试体系活性点与基线对照的重复结果

Nature 2020, 583, 237-241. Fig. 3a

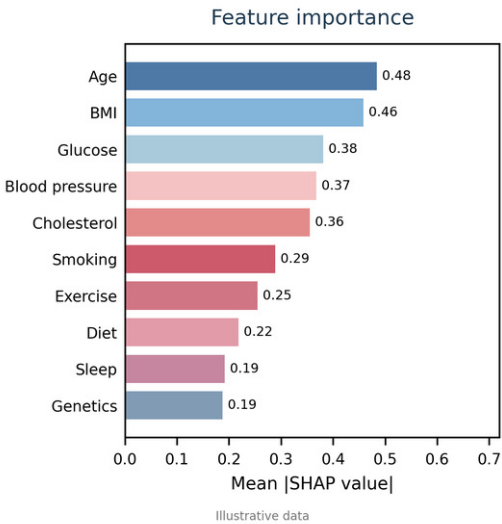
DOI: 10.1038/s41586-020-2442-2

柱状图与分类比较

图267 示例数据

平均绝对特征贡献

SHAP · 重要性 · 特征排序



将各特征的平均绝对贡献按大小排列，用横向柱形和数值标注突出**整体重要性排序与贡献量级**。适合概括模型对不同输入特征的依赖程度，可与逐样本贡献分布配合分析；绝对值汇总关注作用强度，贡献方向需另结合有符号结果。

Illustrative data

画法参考：平均绝对SHAP值排序特征贡献

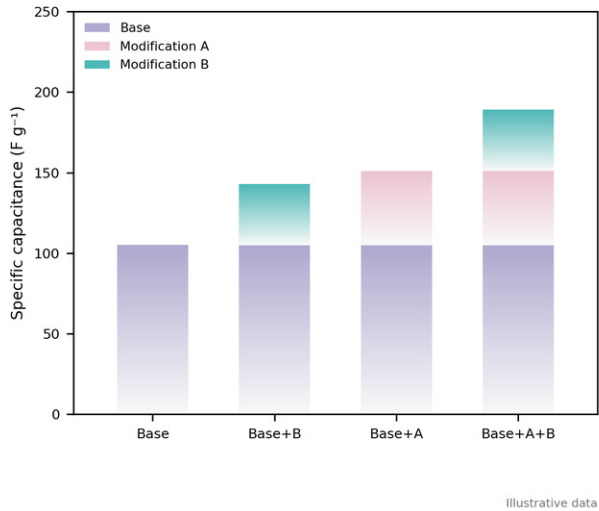
Nat. Mach. Intell. 2020, 2, 56-67. Fig. 4a (left)

DOI: 10.1038/s42256-019-0138-9

图249 示例数据

比电容组分堆叠

比电容 · 贡献分解 · 堆叠柱



以堆叠柱形将各分量及其总量放在共同坐标下，突出**总比电容的变化和不同贡献项的组成差异**。适合比较材料、掺杂或吸附条件，并与结构和界面分析配合说明性能变化；分量定义及其加和关系需与所用模型一致。

Illustrative data

应用参考：不同储能过程的比电容贡献比较

Nat. Commun. 2019, 10, 675. Fig. 5d

DOI: 10.1038/s41467-019-08644-w

画法参考：贡献组分堆叠随实验条件变化

Nat. Commun. 2019, 10, 4913. Fig. 2f

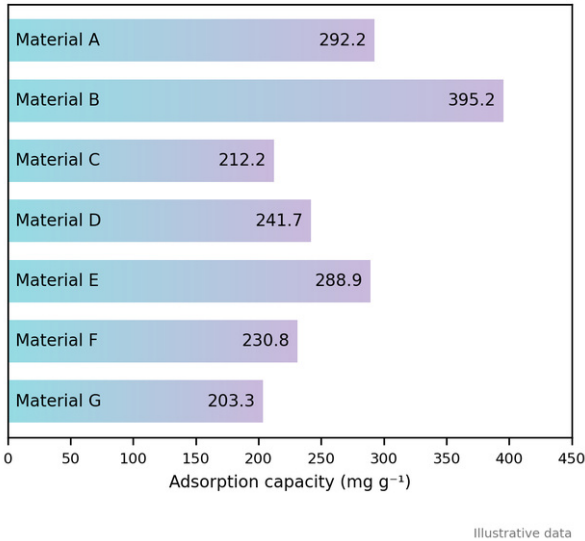
DOI: 10.1038/s41467-019-12900-4

柱状图与分类比较

图250 示例数据

吸附容量横向比较

吸附容量 · 横向柱 · 材料对比



用横向柱形并列展示不同材料或处理条件的吸附容量，将类别名称与数值放在对应位置，便于识别**性能排序**、**容量差异**和**重点比较对象**。适合较长材料名称和较多类别的结果整理，可结合孔结构、比表面积与吸附条件解释变化。

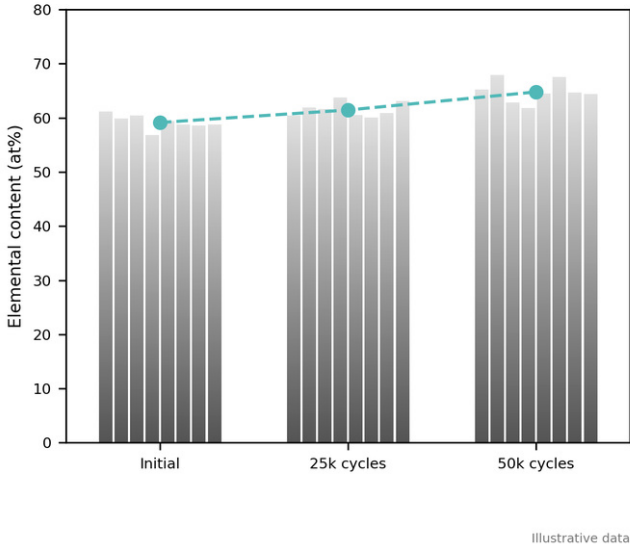
Illustrative data

应用参考：不同吸附材料的容量性能比较
Nat. Commun. 2022, 13, 4169. Fig. 3e
DOI: 10.1038/s41467-022-31575-y

图203 示例数据

不同循环条件的元素含量

元素含量 · 循环条件 · 组间比较



按循环条件分组展示元素含量，并以连接线标示各组的汇总水平，突出**条件变化与组成差异的对应**。单个观测与组级趋势同时可见，适合比较材料在处理或循环过程中的组成响应，并与结构和性能结果共同呈现。

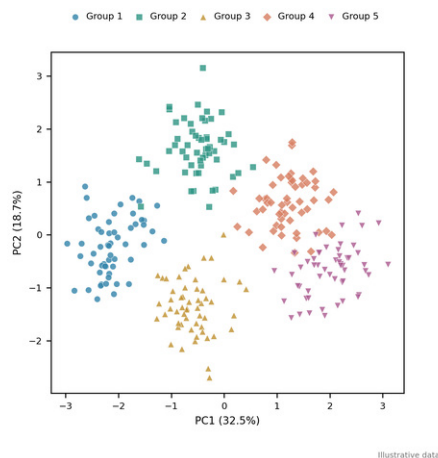
Illustrative data

画法参考：按实验条件分组的个体观测与组级汇总
Nat. Commun. 2024, 15, 10849. Fig. 1f
DOI: 10.1038/s41467-024-55146-5

图001 示例数据

主成分得分与样本分布

主成分 · 降维 · 组间比较



本卡含 2 个展示版本；原编号：图001、图275。

将多维数据投影到主要变化方向，展示**不同样本或体系之间的相似性、分离趋势与组内差异**。颜色和点形区分组别，坐标轴标注主成分的解释方差，可用于比较分子描述符、材料性质或构象特征，观察多项指标共同形成的分布规律。

Illustrative data

画法参考：前两主成分得分与拓扑分类

Nat. Chem. 2021, 13, 488-495. Fig. 4a

DOI: [10.1038/s41557-021-00647-9](https://doi.org/10.1038/s41557-021-00647-9)

应用参考：单组分荧光传感器阵列的PCA区分

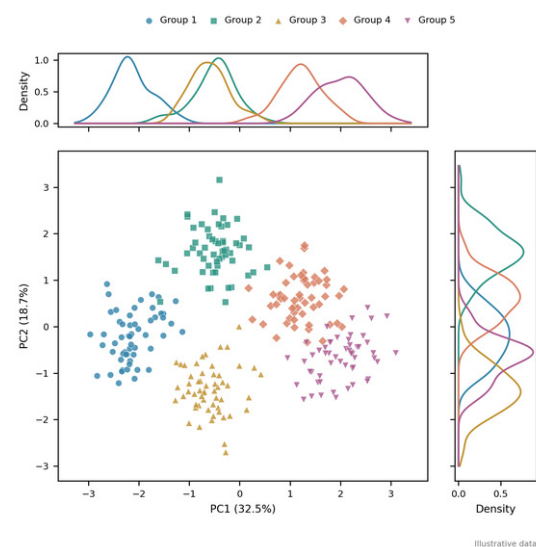
Nat. Commun. 2025, 16, 8130. Fig. 5d

DOI: [10.1038/s41467-025-63519-7](https://doi.org/10.1038/s41467-025-63519-7)

图054 示例数据

PCA得分与分组边缘密度

降维比较 · 分组分布 · 边缘密度



在PCA得分散点旁加入分组边缘密度，可同时比较样本在二维空间中的分离与各主轴上的分布。**组间距离、组内离散和分布重叠**形成清楚的互补信息，适合多变量响应或描述符的组间比较，主轴解释方差与样本分组在图中直接对应。

Illustrative data

画法参考：传感响应PCA得分的样本区分

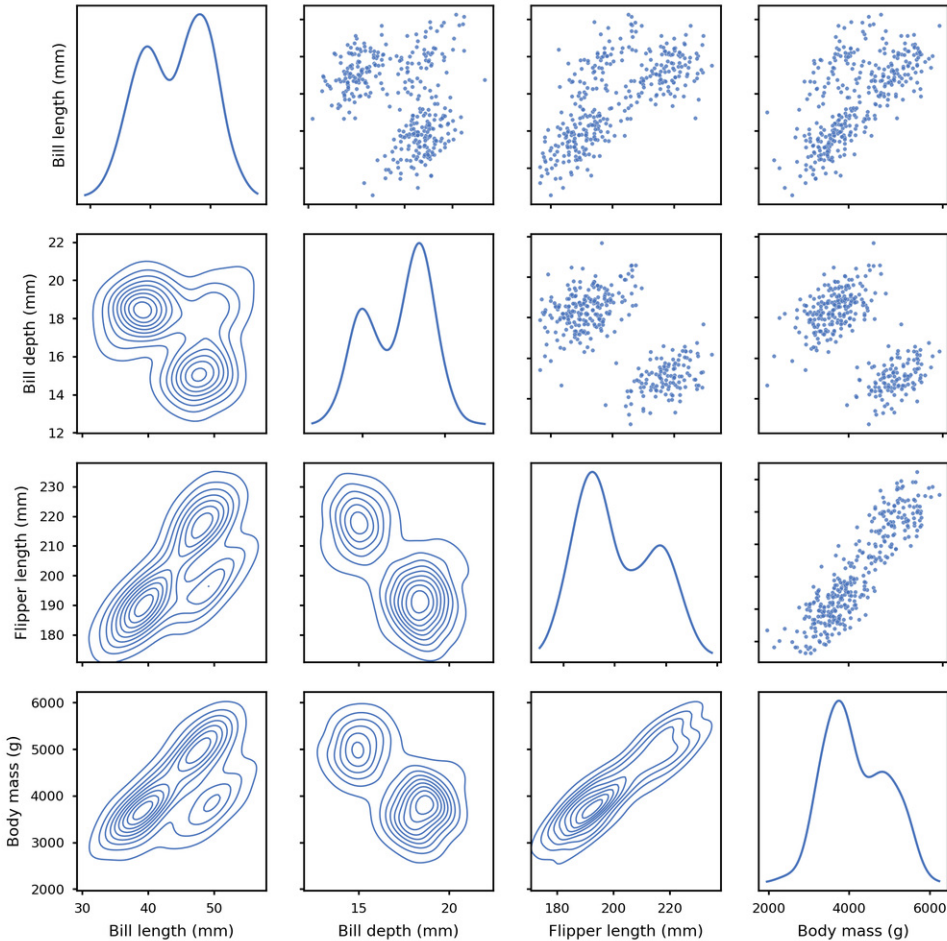
Nat. Commun. 2025, 16, 8130. Fig. 5d

DOI: [10.1038/s41467-025-63519-7](https://doi.org/10.1038/s41467-025-63519-7)

图255 示例数据

多变量成对关系矩阵

成对关系 · 散点矩阵 · 密度轮廓



Illustrative data

把多变量的两两关系排列为矩阵，对角线展示单变量密度，其余单元结合散点和联合密度轮廓。便于同时辨认**变量相关方向**、**组间差异与异常样本**，适合探索结构描述符或多指标数据，为后续变量选择和模型分析提供直观参照。

Illustrative data

画法参考：成对散点矩阵与对角单变量分布

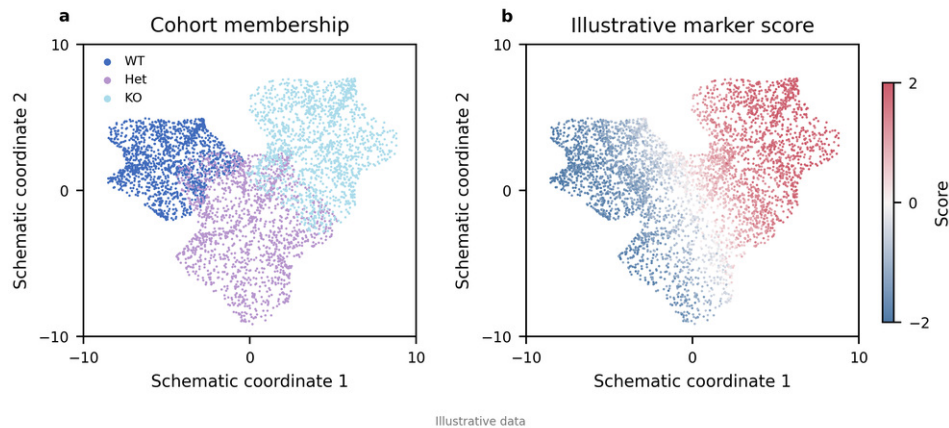
Nat. Commun. 2023, 14, 5022.

DOI: [10.1038/s41467-023-40522-4](https://doi.org/10.1038/s41467-023-40522-4)

图271 示例数据

共享坐标的分组与连续量

共享坐标 · 分类着色 · 连续着色



在同一套二维坐标上并列展示类别和连续指标，突出**样本分组与数值变化在空间中的对应关系**。适合多变量投影或特征分布的互补比较；两个面板保持相同坐标范围与样本位置，使颜色变化可以直接联系到相同对象。

Illustrative data；解析构造坐标，非UMAP计算。

画法参考：同一二维投影按类别和连续量分别着色

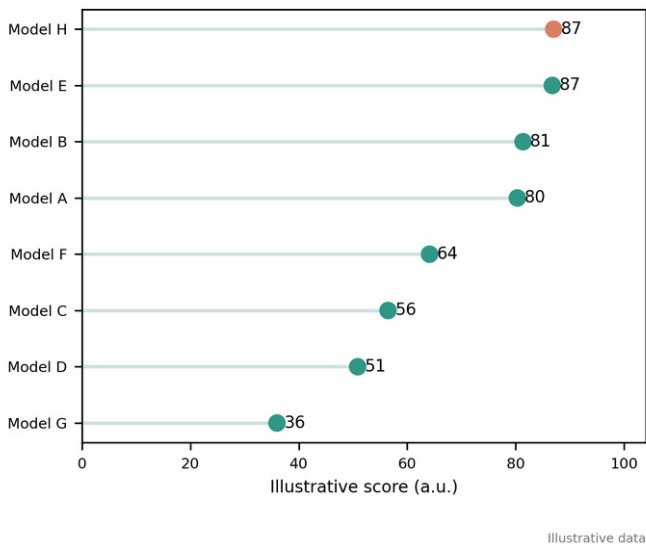
Nat. Commun. 2024, 15, 10849. Fig. 5a-b

DOI: 10.1038/s41467-024-55146-5

图279 示例数据

多模型指标排序点图

排序 · 多模型 · 点图



用**排序点位与轻量引导线**比较多个模型的同一指标，便于观察高低顺序、相邻差距和突出候选。可用于得分、误差或单项性质排名；各模型须采用相同量纲与评价口径，不把离散类别连成连续过程。

Illustrative data

应用参考：跨材料比较预训练势模型的零样本误差

Nature 2023, 624, 80-85. Fig. 3d

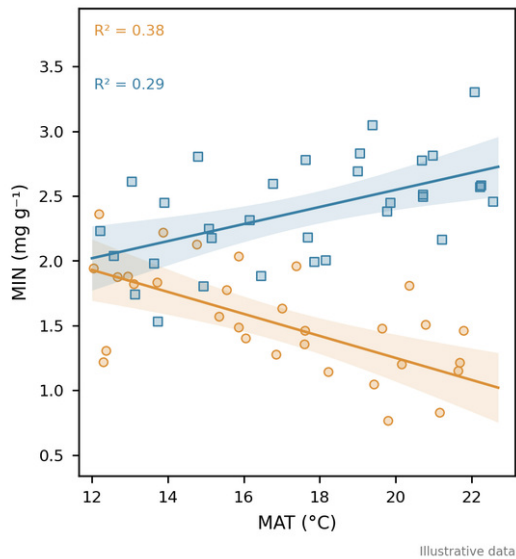
DOI: 10.1038/s41586-023-06735-9

散点图与回归

图263 示例数据

分组回归与拟合区间

线性回归 · 拟合区间 · 组间比较



将观测散点、分组回归线和拟合均值区间叠加，突出**关联方向、趋势差异和拟合不确定性**。适合对照不同条件下两变量之间的关系，可结合决定系数理解趋势对数据变化的解释程度；区间含义和回归模型应明确对应。

Illustrative data；阴影为OLS拟合均值的95%置信区间。

画法参考：散点回归关系与95%拟合区间

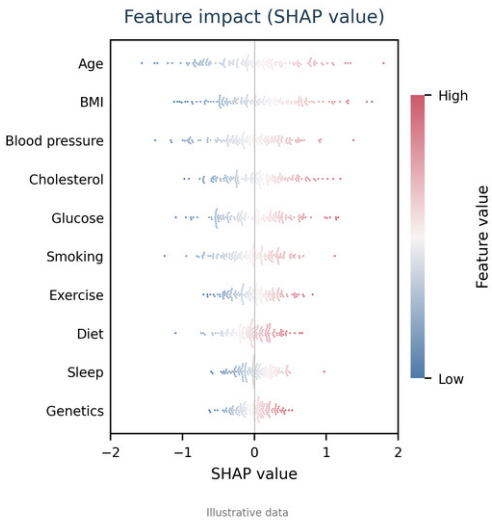
Nat. Commun. 2024, 15, 3063. Fig. 5b

DOI: 10.1038/s41467-024-46764-0

图266 示例数据

特征贡献蜂群图

SHAP · 蜂群图 · 特征贡献



按特征排列样本贡献点，用横向位置表达贡献方向和大小，并以颜色映射特征取值，突出**贡献分布、正负效应与高低取值的对应**。适合解释预测模型和比较特征作用；保留每个样本的贡献量，使总体模式与个体差异同时可见。

Illustrative data

画法参考：SHAP蜂群汇总单个样本的特征贡献

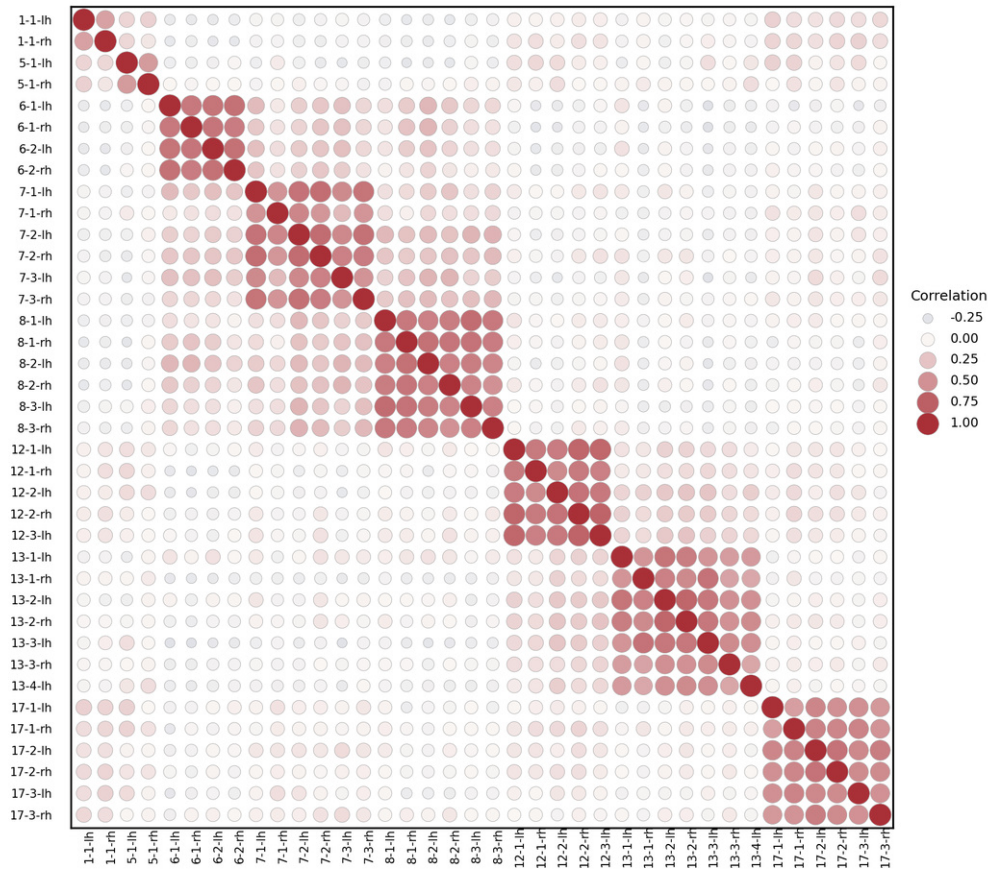
Nat. Mach. Intell. 2020, 2, 56-67. Fig. 4a (right)

DOI: 10.1038/s42256-019-0138-9

图012 示例数据

相关性气泡矩阵

相关分析 · 气泡矩阵 · 多变量



用气泡大小和颜色组织变量之间的相关关系，突出**正负关联、高相关变量及成组出现的关系模式**。矩阵布局适合同次浏览较多指标，可用于分子描述符筛选、性质关联分析，或展示不同结构区域之间的协同变化。

Illustrative data

画法参考：成对相关矩阵呈现免疫变量关联

Nat. Commun. 2022, 13, 5362. Fig. 4a

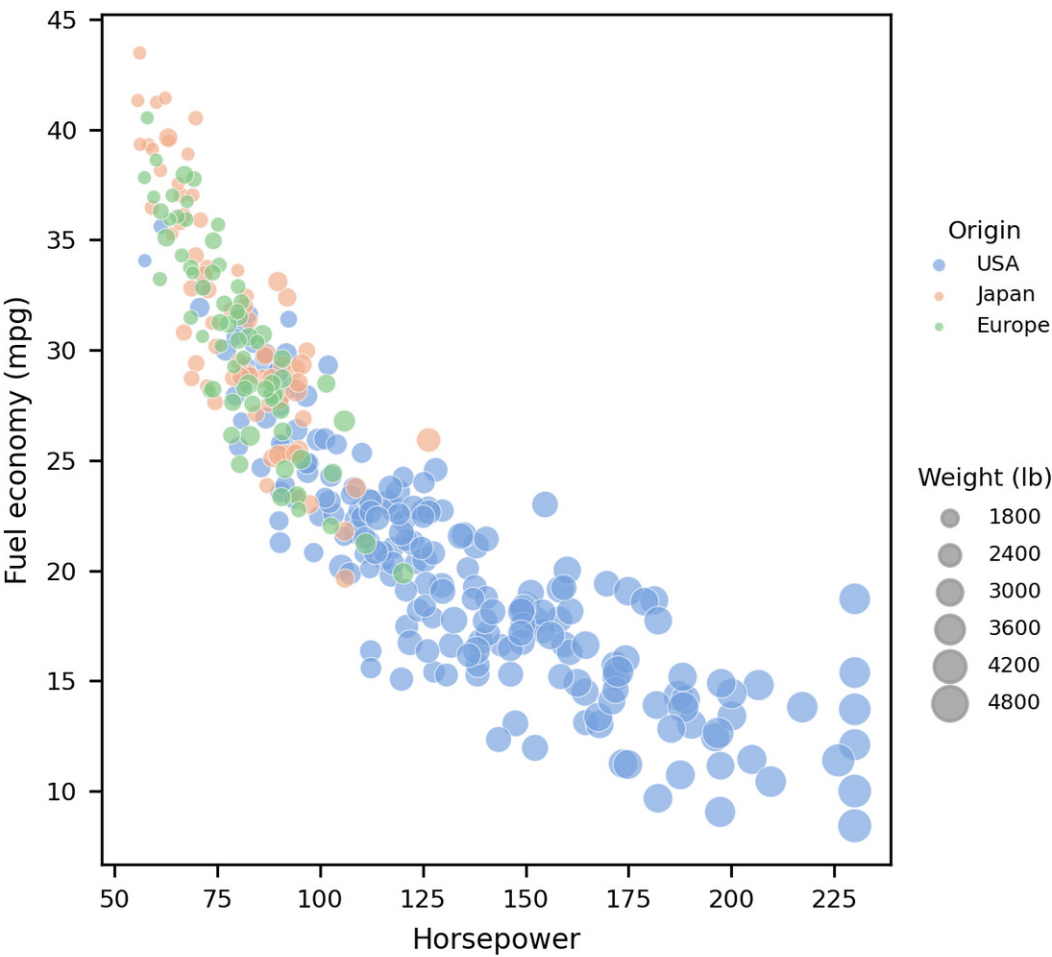
DOI: [10.1038/s41467-022-33036-y](https://doi.org/10.1038/s41467-022-33036-y)

Illustrative data

图256 示例数据

多变量气泡散点图

气泡散点 · 多变量 · 分组着色



以横纵坐标呈现两变量关系，用颜色区分类别并以气泡面积表达第三个连续量，突出**变量关联、类别分布和量级差异**。适合在同一画面比较多维性质；独立的颜色与面积图例帮助读者对应各视觉通道，便于发现局部偏离或集中区域。

Illustrative data

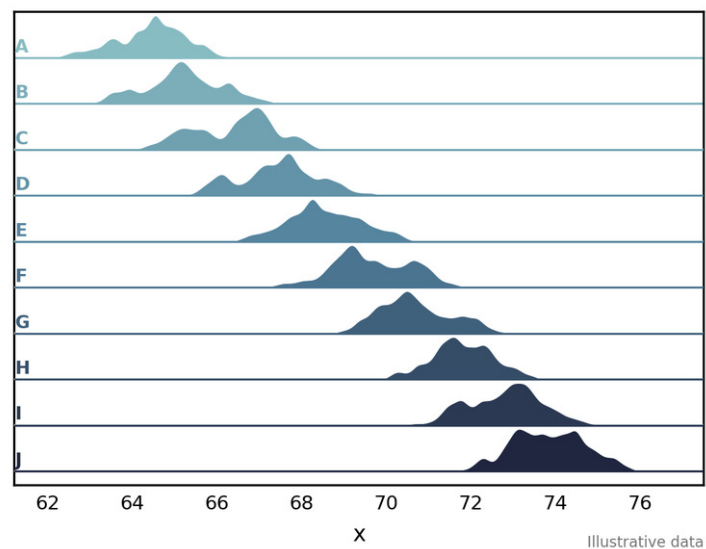
画法参考：同时比较横纵变量、模型类别和资源量的气泡散点
Nat. Commun. 2025, 16, 11406. Fig. 8d
DOI: [10.1038/s41467-025-66220-x](https://doi.org/10.1038/s41467-025-66220-x)

Illustrative data

图051 示例数据

山脊密度图比较多组分布

密度分布 · 多组比较 · 山脊排列



将多组密度曲线沿纵向错开，可在统一横坐标下比较分布位置、宽度和多峰形态。**峰位迁移与分布重叠**适合展示不同体系、条件或时间段的差异，组数较多时仍保持清楚对应。本图采用统一峰高显示，重点在各组分布形状的比较。

Illustrative data

画法参考：山脊密度比较不同温度条件的溶氧异常分布

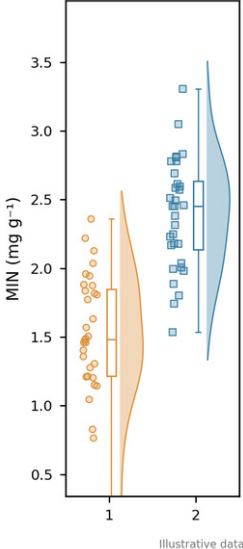
Nat. Commun. 2024, 15, 6840. Fig. 1d

DOI: 10.1038/s41467-024-51323-8

图011 示例数据

雨云图：分布与组间比较

分布统计 · 组间比较 · 雨云图



将样本散点、箱线和密度轮廓放在同一图中，同时呈现**数据的集中位置、离散程度与分布形状**。既能观察整体差异，也能保留个体数值，适合比较不同条件下的能量、结构参数、实验测量值或模型性能。

Illustrative data

画法参考：雨云图展示连续值分布与两组差异

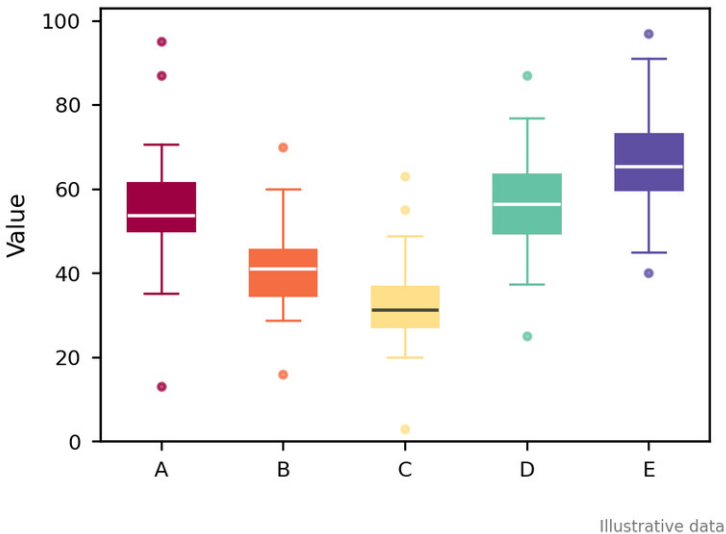
Nat. Commun. 2025, 16, 1425. Fig. 5D-E

DOI: 10.1038/s41467-025-56784-z

图052 示例数据

箱线图比较组间分布

箱线比较 · 分布范围 · 异常值



箱线图用中位数、四分位范围与须概括各组分布，并将范围之外的观测值单独标出。**中心位置和离散程度**可在较紧凑的版面中同时比较，适合多条件或多体系的统计展示，并可与原始散点或密度图搭配，补充个体差异和分布形态。

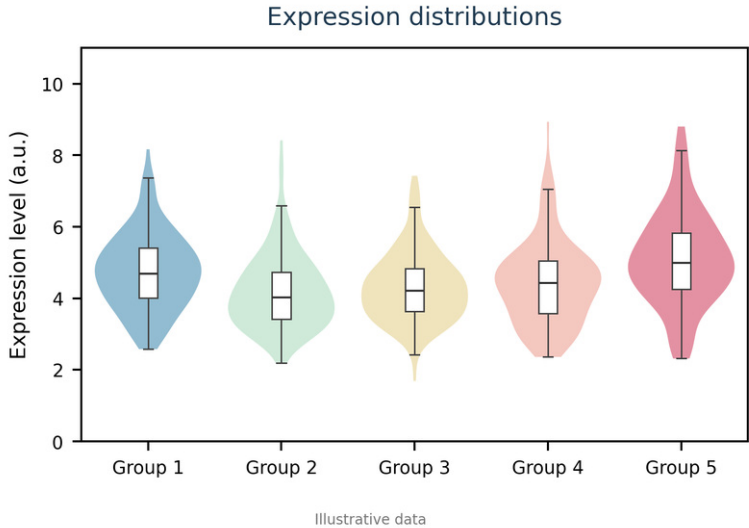
Illustrative data

画法参考：箱线图比较两组分布与离散度
Nat. Commun. 2025, 16, 9867. Fig. 4b-b'
DOI: 10.1038/s41467-025-64848-3

图274 示例数据

小提琴与箱线组合

小提琴 · 箱线 · 分布比较



以小提琴轮廓展示各组数据的分布形态，嵌入箱线概括中位数、四分位区间和须范围，突出**偏态、多峰、中心位置与组间离散差异**。适合连续指标的分组比较，将完整分布与稳健统计放在同一画面，便于联系整体形态和中心趋势。

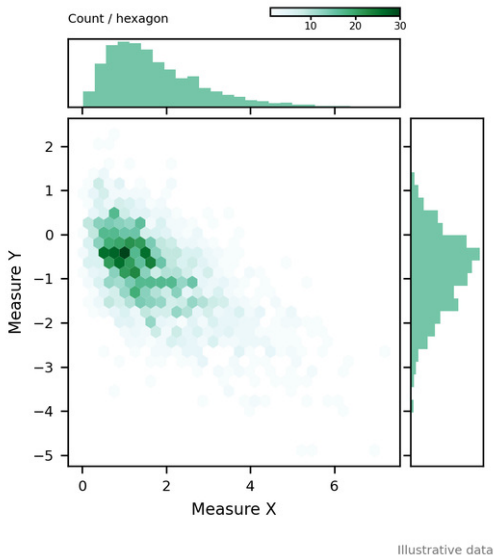
Illustrative data

画法参考：箱线汇总多种特征与模型的预测能力; 画法参考：小提琴密度呈现模型跨条件泛化分布
Nat. Commun. 2019, 10, 5537. Fig. 5a; Fig. 4
DOI: 10.1038/s41467-019-13511-9

图103 示例数据

二维计数密度与边缘分布

二维分布 · 计数密度 · 边缘分布



六边形分箱将密集散点组织为二维计数分布，旁侧直方图补充每个变量的单独分布。**高密度区域、关系形状与偏态尾部**可以在同一版面同时阅读，适合大量观测值的联合比较，并用一致的分箱和计数色阶清楚展示观测聚集的位置与范围。

Illustrative data

画法参考：二维六边形分箱呈现密集成对观测

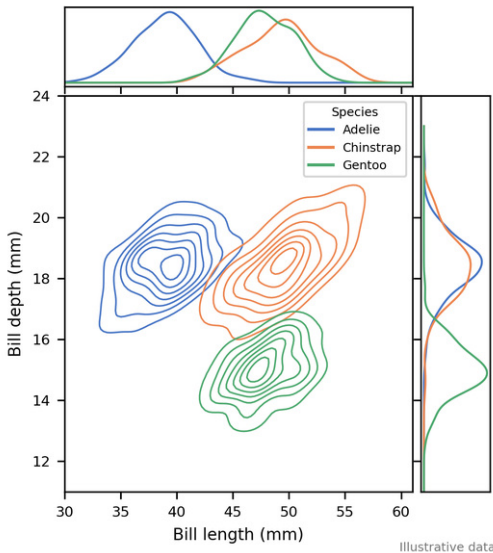
Nat. Commun. 2021, 12, 2290. Fig. 1c-d

DOI: 10.1038/s41467-021-22341-7

图254 示例数据

联合分布与边缘密度

联合密度 · 边缘分布 · 组间比较



在中心面板显示两变量的联合密度轮廓，并在边缘分别展示单变量分布，突出**分组分离、变量耦合和分布宽度**。适合比较不同样本群体、结构描述符或性质分布；中心与边缘使用同一批观测，使整体关系和局部统计对应。

Illustrative data

画法参考：二维联合概率分布与两轴边缘分布

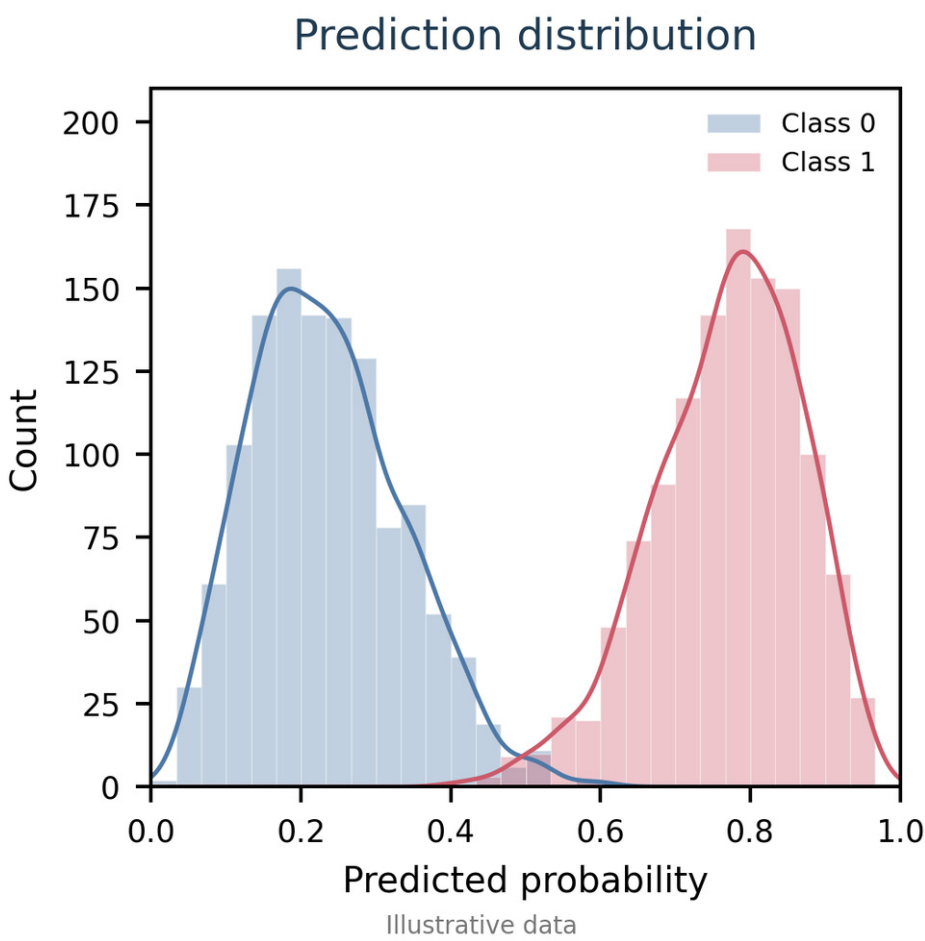
Nat. Commun. 2019, 10, 2785. Fig. 2a-d

DOI: 10.1038/s41467-019-10810-z

图270 示例数据

分类预测概率分布

预测概率 · 直方图 · 核密度



将不同类别的预测概率绘成共用分箱的直方图，并叠加与计数尺度对应的密度曲线，突出**类别分离、分布重叠和概率集中区**。适合检查二分类结果的表达方式，可与阈值和混淆矩阵配合分析，保持概率范围与计数归一化定义一致。

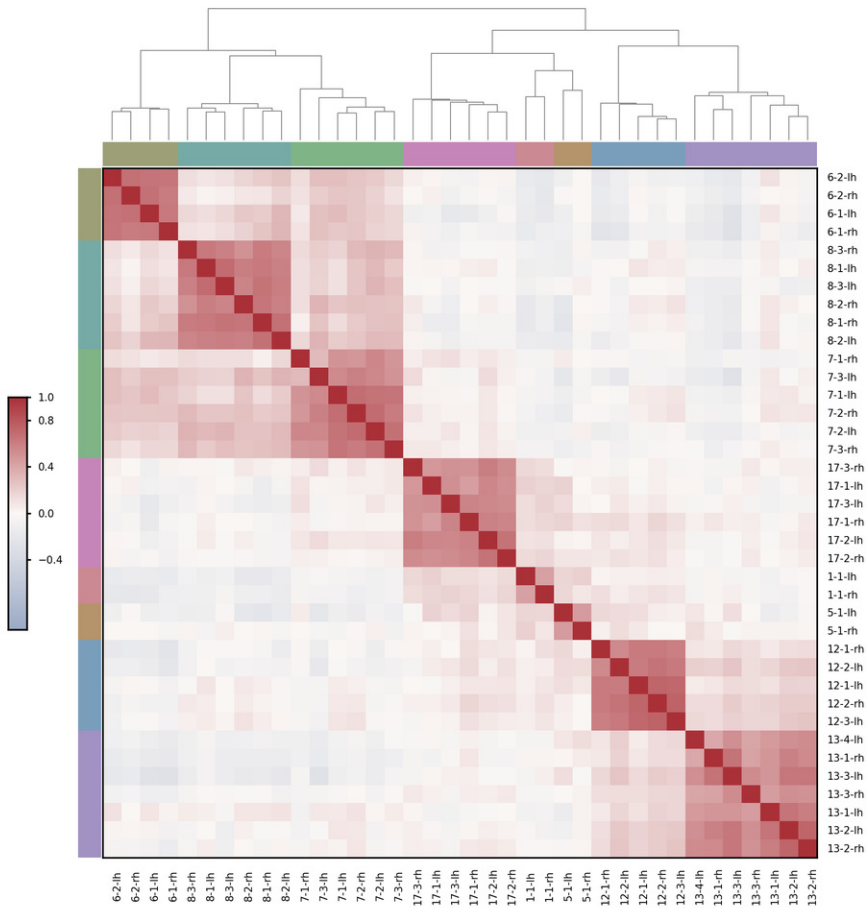
Illustrative data

应用参考：不同标签类别的模型预测概率分布
Nat. Commun. 2024, 15, 3063. Fig. 3a
DOI: [10.1038/s41467-024-46764-0](https://doi.org/10.1038/s41467-024-46764-0)

图053 示例数据

聚类相关热图与变量分组

相关矩阵 · 层次聚类 · 变量分组



用颜色编码变量间的相关程度，并借助层次聚类调整排列，可显露相近变量的成组结构。**块状关联、组间差异与反向关系**在矩阵中直观可见，树状图和类别色条提供额外组织线索，适合多指标或多组信号的整体比较，并与气泡矩阵形成互补表达。

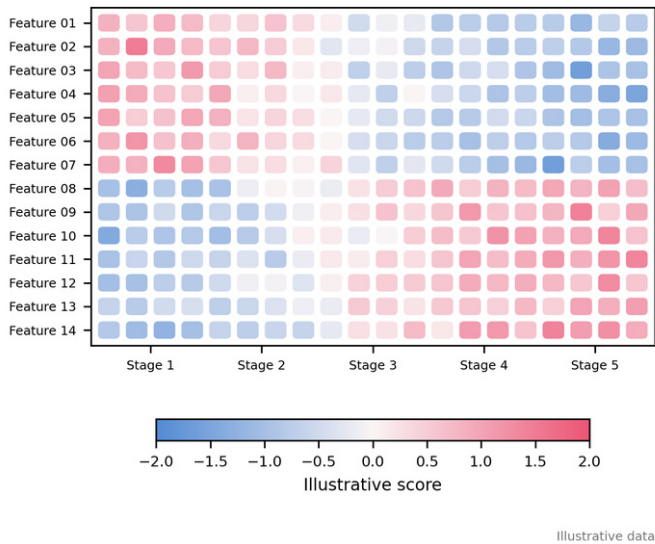
Illustrative data

画法参考：相关矩阵按层次聚类组织变量
Nat. Commun. 2022, 13, 6896. Fig. 2a-b
DOI: [10.1038/s41467-022-34720-9](https://doi.org/10.1038/s41467-022-34720-9)

图264 示例数据

分组指标评分矩阵

评分矩阵 · 阶段比较 · 双向色阶



将指标、阶段和分组组织为矩阵，以固定大小色块表达评分高低，突出**响应模式、阶段性变化和组间差异**。适合多指标时间阶段比较或特征评分整理，分区标记帮助对应层级关系，共用色阶使不同位置的数值保持可比。

Illustrative data

画法参考：按模型/指标排列并归一化的评分矩阵

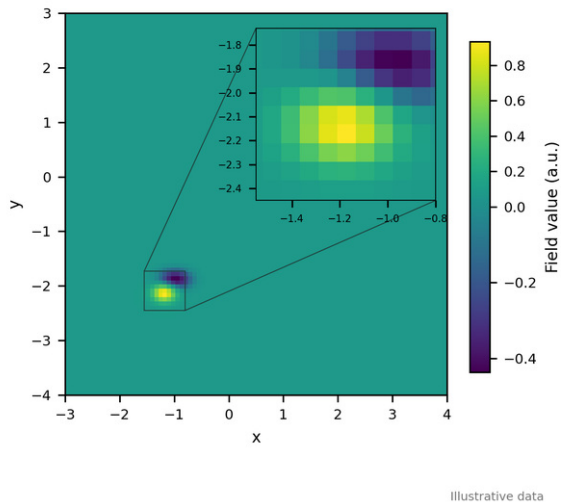
Nat. Mach. Intell. 2020, 2, 56-67. Fig. 3

DOI: [10.1038/s42256-019-0138-9](https://doi.org/10.1038/s42256-019-0138-9)

图257 示例数据

热图与局部放大

热图 · 局部放大 · 统一色阶



在整体热图内标记关注区域，并用放大窗口展示同一网格的局部细节，突出**局部极值、细微梯度及其在整体场中的位置**。适合空间分布或二维响应面的展示；主图与放大图共享色阶和原始数值，使细节比较保持一致。

Illustrative data

画法参考：全局点图关联局部热图细节

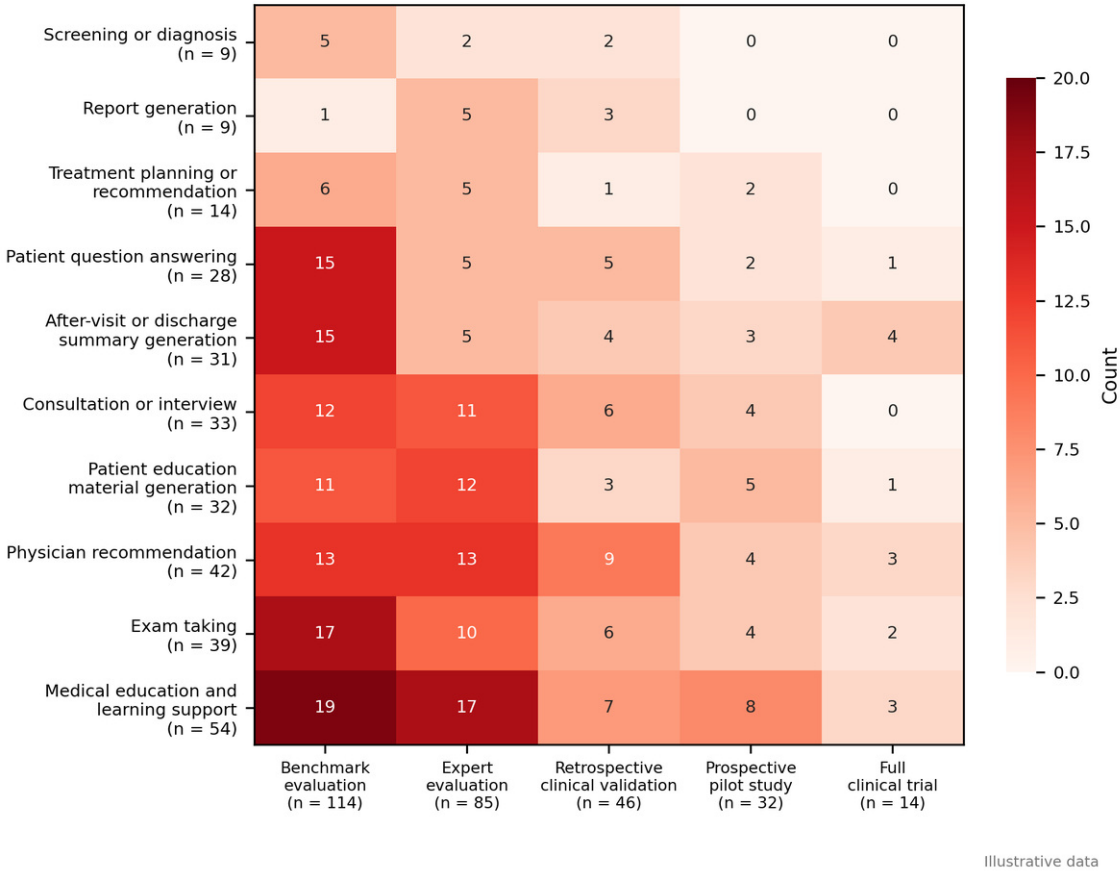
Nat. Commun. 2024, 15, 3063. Fig. 3b

DOI: [10.1038/s41467-024-46764-0](https://doi.org/10.1038/s41467-024-46764-0)

图251 示例数据

研究类别与验证阶段矩阵

计数矩阵 · 类别比较 · 验证阶段



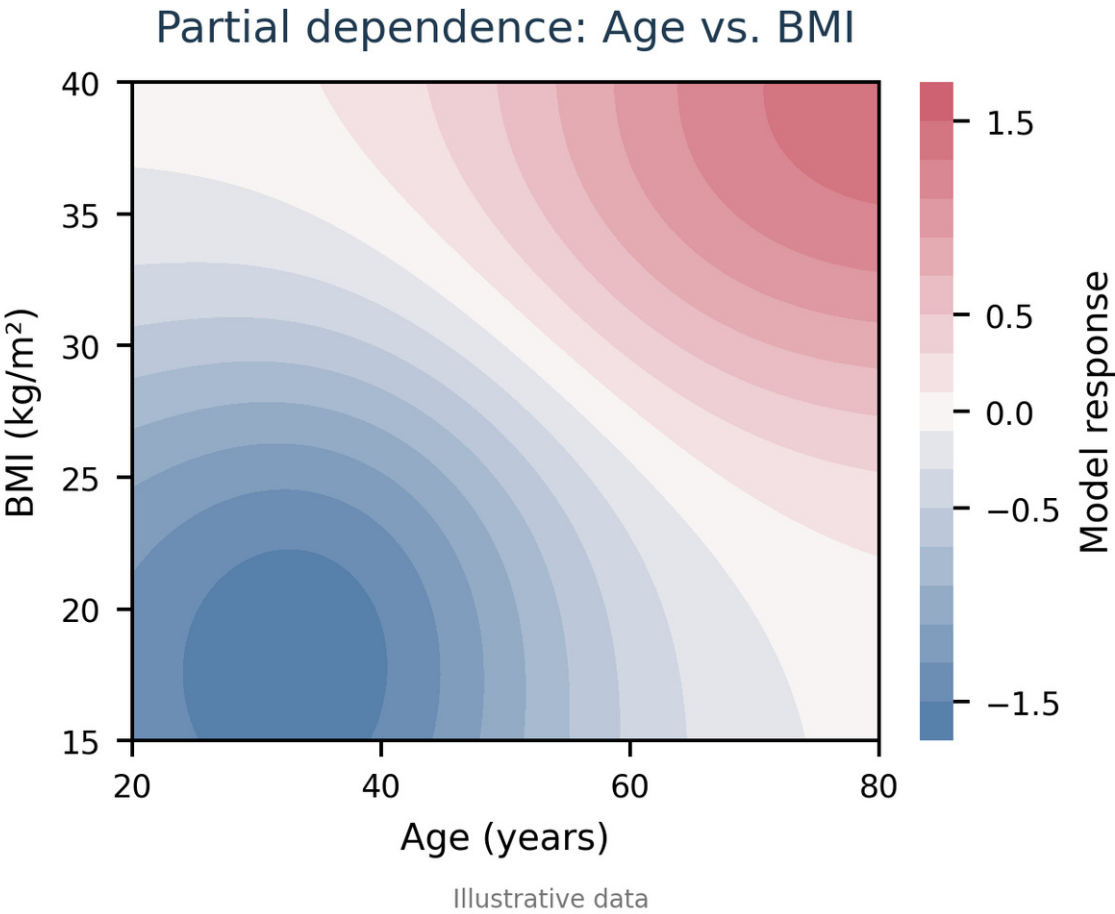
将研究类别和验证阶段组成二维矩阵，以色深和数值标注展示每个交叉类别的数量，并在边缘汇总规模。适合辨认**研究分布、集中方向与较少覆盖的组合**，用于整理研究版图、模型评价或多阶段任务清单，保持统计口径和分类规则一致。

Illustrative data
画法参考：两个分类维度交叉形成分布矩阵
Nat. Commun. 2024, 15, 6840. Fig. 1a-b
DOI: 10.1038/s41467-024-51323-8

图268 示例数据

双变量偏依赖响应

偏依赖 · 等高线 · 模型响应



用填色等高线展示模型响应随两个特征变化的关系，突出**高低响应区、非线性趋势与联合作用**。适合探索预测模型的响应面或比较参数区间，颜色与等高层级对应同一响应量，可帮助确定后续分析中需要关注的变量组合。

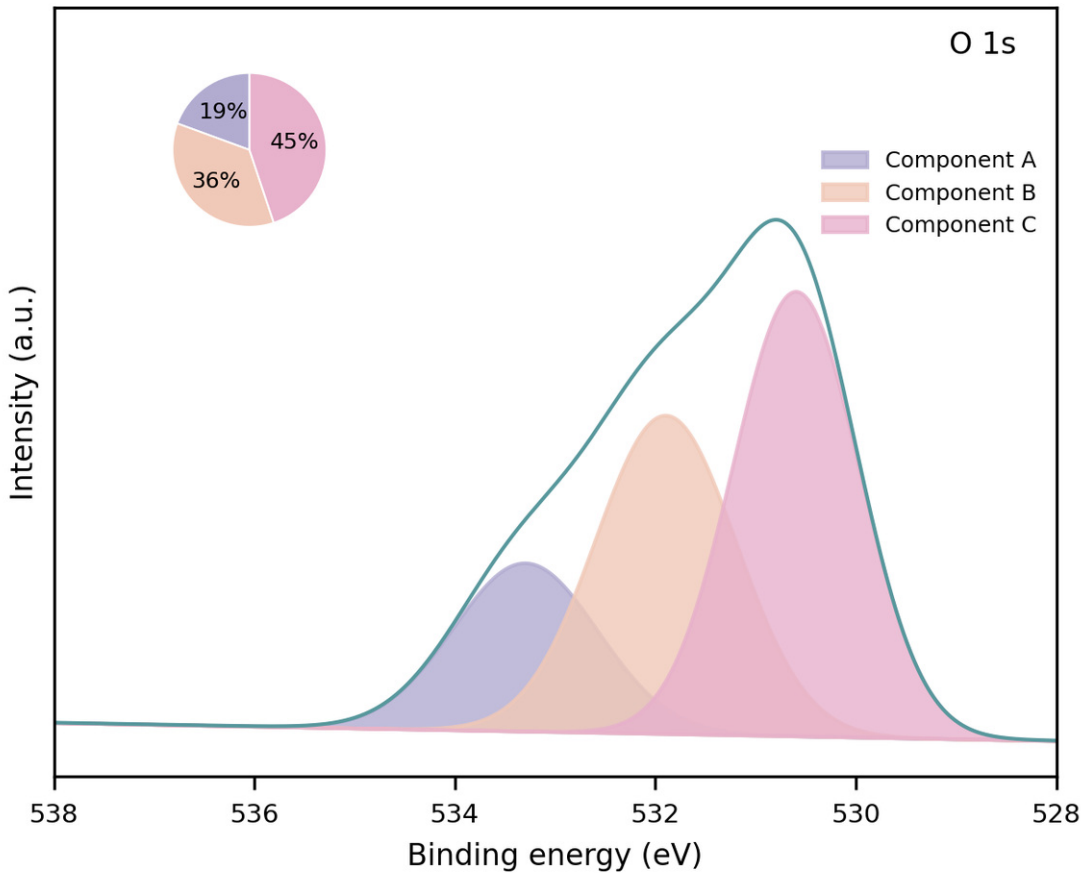
Illustrative data

画法参考：双变量偏依赖面及特征空间覆盖
Nat. Commun. 2019, 10, 5537. Fig. 5b
DOI: [10.1038/s41467-019-13511-9](https://doi.org/10.1038/s41467-019-13511-9)

图248 示例数据

XPS分峰与组分占比

XPS · 分峰 · 峰面积



Illustrative data

将总谱、背景与组分峰放在同一结合能坐标下，并用面积比例补充组成信息，突出**峰位变化、峰形叠加与不同化学环境的相对贡献**。适合对照材料表面化学态及处理前后的谱学特征，帮助组织分峰结果与组分比较。

Illustrative data; 组分A–C为示例谱峰，不作化学态归属。

画法参考：XPS实验谱、总拟合与分峰曲线并置

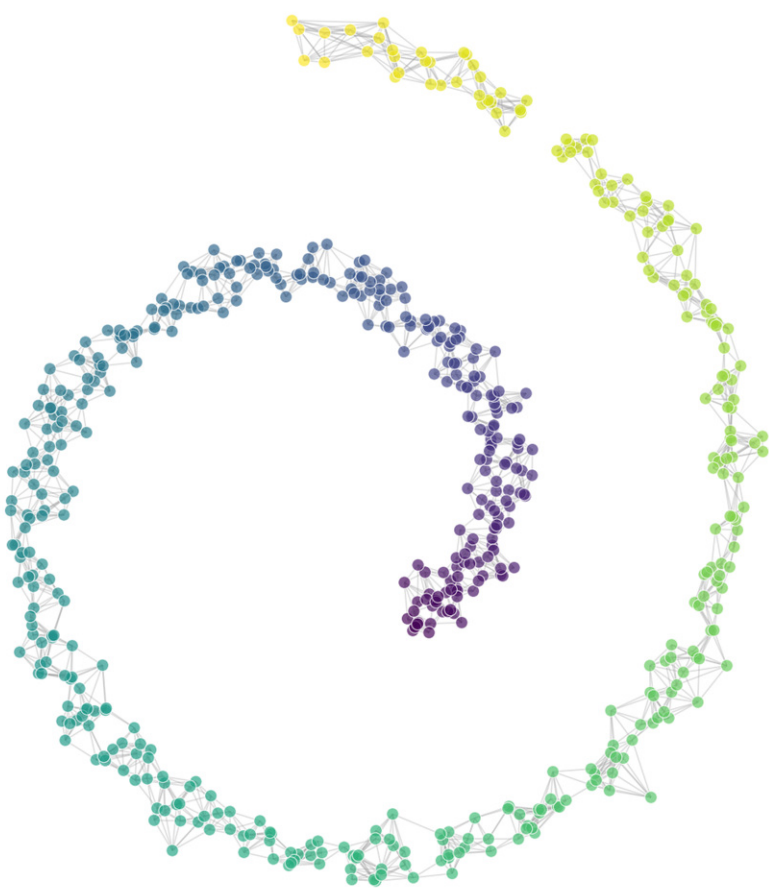
Nat. Mater. 2010, 9, 430-435. Fig. 3a-c

DOI: 10.1038/nmat2711

图253 示例数据

点云近邻连接网络

点云 · 近邻网络 · 连续着色



Illustrative data

将点云位置与近邻连线叠加，用连续颜色标记点在序列或参数中的位置，突出**局部邻接关系、整体几何形态与连续变化方向**。适合展示采样空间或几何网络的连接模式，也可作为网络布局的表达参考，连接规则应随数据定义保持一致。

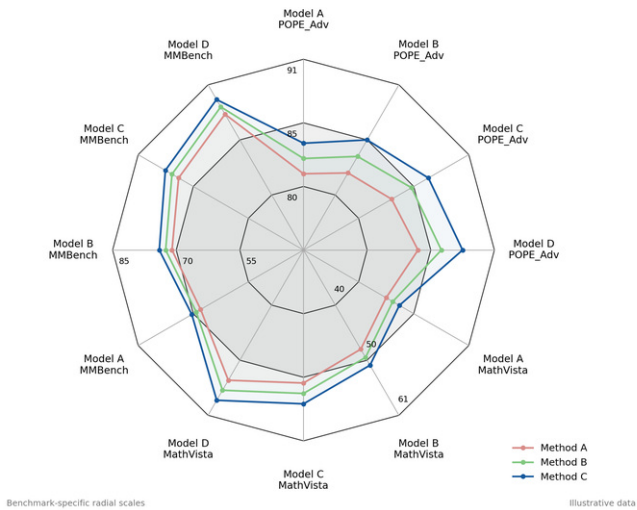
Illustrative data

画法参考：样本点云的近邻连接与局部几何
Nat. Commun. 2020, 11, 2966. Fig. 1c-d
DOI: [10.1038/s41467-020-16822-4](https://doi.org/10.1038/s41467-020-16822-4)

图252 示例数据

多基准指标雷达图

雷达图 · 多指标 · 基准对比



沿不同指标轴展示各方法的性能轮廓，借助折线与标记对照**优势指标、短板及方法间的相对变化**。适合多基准评价和多目标比较；各轴刻度可依据指标范围设置，读图时结合对应尺度比较单项表现，避免将轮廓面积作为总评分。

Illustrative data；不同基准使用各自的径向刻度。

画法参考：雷达图比较多种性能维度

Nat. Commun. 2019, 10, 675. Fig. 6c

DOI: 10.1038/s41467-019-08644-w

画法参考：雷达图比较模型在多个测试类别的表现

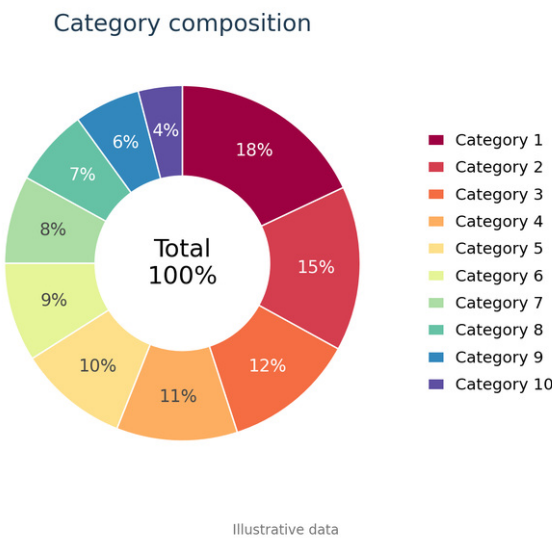
Nat. Commun. 2024, 15, 3063. Fig. 2a

DOI: 10.1038/s41467-024-46764-0

图272 示例数据

分类组成环图

组成比例 · 环图 · 百分比



将各类别占总体的比例画为环形分区，结合百分比和图例突出**主要组成、少量类别与总体分配**。适合展示样本构成、任务类别或组分占比，可与总量比较配合；各分区使用同一总体口径，使百分比和完整组成相互对应。

Illustrative data

画法参考：环图呈现类别组成和占比

Nat. Commun. 2024, 15, 10259. Fig. 2h

DOI: 10.1038/s41467-024-54710-3