

## 2015 年 DMol<sup>3</sup> 高级培训班 培训通知

**课程时间：2015 年 12 月 21-23 日，共三天**

**课程地点：创腾科技培训中心（上海浦东新区芳甸路 1088 号紫竹国际大厦 2104 室）**

### 一、培训主旨

培训班旨在帮助用户熟练各种模型的搭建方法，并以纳米材料、催化反应等领域中已发表的研究工作为例，讲解 DMol<sup>3</sup> 的参数设置技巧，高精度计算功能实现方法、化学反应相关计算任务的使用方法、重要物性的表征、计算结果的分析方法、使用过程可能遇到的问题及其解决方案等，使学员在 DMol<sup>3</sup> 模块的使用方面有更为深刻的理解和提高。

### 二、培训对象

DMol<sup>3</sup> 高级培训班以复杂模型搭建、深层次的软件应用为核心，主要针对有一定分子模拟研究经验，以及想进一步提高软件使用水平的科研人员。

### 三、培训形式

培训将以已发表研究工作为基础，由工程师带领所有学员重复其中的重要步骤，并负责现场答疑。

### 四、培训时间

2015 年 12 月 21-23 日，9:00~12:00 & 13:30~18:00。

### 五、课程费用

培训费用	1 人参加	优惠条件：1、同一单位≥2 人，可享受优惠； 2、同一学员(2011 年-至今)参加过 MS 培训班，可享受优惠
学术客户	3600/人	3000/人
企业客户	5400/人	4500/人

注：1、培训费包含听课费、资料费、上机费、午餐。住宿和交通费自理。

3、统一开具发票内容为“培训费”，发票将在培训期间发给学员，若您对发票内容有特殊要求请务必在回执中注明。

### 六、报名方式

• **报名方式：**登录创腾学院官网 <http://training.neotrident.com/> 在线提交或下载**报名回执**。名额有限，报名从速，额满为止。

## • 付费方式：

### a、银行汇款（请在汇款时务必备注参加人员姓名）

户名：北京创腾科技有限公司上海分公司

开户行：中国工商银行上海市分行浦东开发区白杨路支行

账户：1001154119006907319

### b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。

## 七、周边住宿(请学员自行预定，费用自理)

- 宾馆名称：锦江之星（上海磁悬浮总站）021-51099066  
宾馆地址：上海浦东新区白杨路 260 号（浦东新国际博览中心 近龙阳路）
- 宾馆名称：锦江之星（新国际博览中心店）021-68920708  
宾馆地址：上海浦东新区芳华路 37 号（浦东新国际博览中心 近沪南路）
- 宾馆名称：汉庭酒店(上海龙阳路店) 021-61657988  
宾馆地址：上海市浦东新区龙阳路 2000 号（近白杨路，磁悬浮总站）

注：以上三个经济型酒店供学员参考。因培训地址离国际博览中心较近，遇到展览旺季，周边住宿非常紧张，提醒学员提早预定住宿。

## 八、交通地图

交通：乘地铁 7 号线花木路站下，4 号出口，出站即到。



地理位置



紫竹大厦

## 九、培训班联系人

创腾科技有限公司 市场部

电话：021-58353866-219 ( 崔小姐 )，13916476330

021-58353866-233 ( 陈小姐 )，13916858963

Email：[market@neotrident.com](mailto:market@neotrident.com)

培训网站：<http://training.neotrident.com/>



附件：培训班课程日程安排

### 附件：培训班课程日程安排

日期	时间	内容
第一天	08:30-09:00	报到注册、领取资料
	09:00-10:30	DMol3 介绍和应用实例讲解
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	MS 高级建模 (一) 主要内容：自定义分子片段的使用，团簇结构的选取，分子位置的精确移动，使用测量工具辅助模型搭建。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	MS 高级建模 (二) 主要内容：使用分子动力学模拟辅助模型搭建，复合材料定向填充，显性溶剂层的选取。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:45	DMol <sup>3</sup> 参数和功能使用技巧 主要内容：重要参数的原理、设置技巧、使用注意事项；常见问题的处理方法；关键字的设置和应用方法；高精度计算的案例操作 ( 基组重叠误差 BSSE 修正、DFT+D 修正等 )
	16:45-17:00	茶歇
17:00-18:00	课程讨论及答疑	
第二天	09:00-10:30	DMol3 在纳米材料领域的应用实例讲解及需要解决的问题 主要包含：典型前沿案例的分享、深层的相互理论介绍，需要解决的问题
	10:30-10:45	茶歇

	10:45-12:00	<b>DMol3 中在纳米材料领域中的应用（一）</b> 主要内容：以复合纳米材料（表界面、掺杂对纳米材料性质的影响）为主要操作案例，讲解计算参数和模型搭建的设置技巧，以及相关性质的计算和分析。
	12:00-13:30	<b>午餐</b>
	13:30-15:30	<b>DMol3 中在纳米材料领域中的应用（二）</b> 主要内容：以纳米碳材料（碳材料，弱相互作用的处理）为主要操作案例，讲解计算参数和模型搭建的设置技巧，外加电场使用，透射系数、伏安曲线等输运性质的计算等。
	15:00-15:15	<b>茶歇</b>
	15:15-16:45	<b>DMol3 在催化领域的应用实例讲解及需要解决的问题</b> 主要包含：典型的前沿案例分享、深层的相关理论介绍，需要解决的问题。
	16:45-17:00	<b>茶歇</b>
	17:00-18:00	<b>课程讨论及答疑</b>
<b>第三天</b>	09:00-10:30	<b>DMol3 在化学反应中应用（一）</b> 主要内容：以纳米材料(团簇、碳材料)为主要操作案例，讲解计算参数的设置技巧，化学反应的原理、过渡态的搜索和确认方法，热力学性质的计算
	10:30-10:45	<b>茶歇</b>
	10:45-12:00	<b>DMol3 在化学反应中应用（二）</b> 主要内容：中间体的搜索和确认方法、反应路径的确认、化学反应速率常数、平衡常数的计算方法，使用过程中需要解决和注意的问题，关键词的使用，缺陷体系的研究，化学反应相关物性的表征等
	12:00-13:30	<b>午餐</b>
	13:30-15:30	<b>DMol3 在化学反应中应用（三）</b> 主要内容：以金属、合金、金属氧化物为实例讲解计算过程中的注意事项、特别计算参数的设置，吸附能、表面能等的计算，反应过程的研究方法等
	15:30-15:45	<b>茶歇</b>
	15:45-16:45	<b>DMol3 在材料、化学中的应用总结与讨论</b>
	16:45-17:00	<b>茶歇</b>
	17:00-18:00	<b>课程讨论及答疑</b>