

2015 年 DFTB+的原理、方法和使用技巧培训班 培训通知

课程时间：2015 年 10 月 29-30 日，共两天

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密度泛函紧束缚方法（DFTB）可研究的模型的搭建方法，如固体材料、纳米材料、输运模型等，在此基础上了解 DFTB 的理论背景，基本框架和参数的意义及设置。掌握 DFTB 结构设计和优化、电子结构性质、动力学反应、参数化、输运性质等功能的操作设置方法和结果获取；使用过程可能遇到的问题及其解决方案等，使学员在分子模拟使用方面有更为深刻的理解和提高。培训本着“理论结合实践、学以致用”的原则，利用创腾科技上海培训中心提供的软硬件环境，为广大学员提供分子模拟计算的深入体验。

二、培训对象

该培训班以 DFTB+的原理、参数设置、使用方法为核心，主要针对希望接触和了解密度泛函紧束缚方法的老师和同学，或者有一定分子模拟经验，希望进一步系统提高软件使用水平的科研人员。

三、培训形式

所有学员每人一台计算机，培训过程中在工程师讲解时，学员上机操作，并有工程师进行现场答疑。

四、培训时间

2015 年 10 月 29 日-30 日，09:00~12:00 & 14:00~18:00。（其中 25 日 8:30-9:00 为报到时间）

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
教育科研客户	2400/人	2000/人
政府科研/企业客户	3600/人	3000/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、统一开据发票内容为“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（仅供参考，请学员自行预定）

- 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

十、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

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



创腾科技有限公司 材料科学部
2015年9月8日

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	8:30-9:00	报到注册、领取资料
	9:00-10:30	背景和实例建模 <ul style="list-style-type: none"> DFTB+背景和应用实例介绍 DFTB+模型搭建方法和技巧
	10:30-10:40	茶歇
	10:40-12:00	基本原理和参数介绍 <ul style="list-style-type: none"> DFT 方法 TB 方法 DFTB 的基本原理 DFTB 模块面板参数意义及使用注意事项
	14:00-15:30	结构优化和性质获取 <ul style="list-style-type: none"> 结构优化流程 能带结构、电子态密度、电子密度、轨道、布居 声子计算
	15:30-15:40	茶歇
	15:40-17:30	输运性质 <ul style="list-style-type: none"> 输运性质计算案例分享 输运性质计算的基本原理 电流电压曲线获取 输运函数获取
	17:30-18:00	答疑
日期	时间	内容
第二天	09:00-10:30	几何优化和动力学案例演示和操作(一) <ul style="list-style-type: none"> 纳米材料、体材料的优化 动力学计算案例分享 动力学计算基本原理及参数意义
	10:30-10:40	茶歇
	10:40-12:00	几何优化和动力学案例演示 <ul style="list-style-type: none"> 结合具体案例讲解动力学的使用方法 参数设置技巧、注意事项及结果分析
	14:00-17:30	参数拟合 <ul style="list-style-type: none"> DFTB 中的参数作用 参数化原理及意义 DFTB 模块参数化面板中各参数意义 如何调用外部数据库参数到 MS-DFTB 参数拟合计算流程及试做新的参数
	17:30-18:00	答疑