

分子模拟在表面科学和能源研究中的应用

——DMol³高级培训班

表面科学涉及化学、材料、物理、生物等多学科的交叉领域，是应用化学、化学工程、材料科学、资源环境及其他相关专业关心的核心问题之一，在当前科学研究和工程应用中扮演着日益重要的角色。能源是人类活动的物质基础。在当今世界，能源的发展，能源和环境，是全世界、全人类共同关心的问题。在表面科学和能源研究领域，从原子层级对与表面、复杂体系相关化学行为和化学反应过程的解析能够帮助研究人员理解实验现象，解释作用机理，评价材料性能，辅助推动新型材料的开发和设计。

MS DMol³ 基于 LCAO 密度泛函原理，尤其擅长处理表界面化学反应和化学行为的相关问题，在表界面研究、催化反应机理和新型材料设计领域拥有十分广泛的应用。为**矿物加工、表面腐蚀、能源催化、储能材料、锂电池、太阳能电池**等复杂体系的原子层级理解提供了可行的解决方案。

课程时间：2019年10月15-17日(周二~周四)，共三天

课程地点：苏州创腾科技培训中心（江苏省苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301室）

一、培训主旨

培训班旨在帮助学员熟悉和掌握基于 DMol³ 的量子力学计算方法。以量子力学方法在表面科学和能源研究中的应用为核心，基于全尺度分子模拟平台 Materials Studio 中的 DMol³ 模块，从实际应用案例出发，讲解 DMol³ 在表界面化学行为处理中的参数设置技巧，高精度计算功能实现方法、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，帮助学员深入掌握 DMol³ 模块的功能特点，应用领域和参数设置技巧。

二、培训对象

本课程以表面科学和能源研究相关的复杂模型搭建、深层次的软件应用和设置技巧为核心，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，在工程师讲解时，所有学员能够上机操作，并有工程师进行现场答疑。

四、培训时间

2019年10月15~17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(满足任一条件即可)
4200/人	1、同一单位≥2人参加。 2、同一学员之前(2011年至今)参加过MS培训班。
	3600/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。

2、收到您的报名费后，我们会将 PDF 版本 Materials Studio 基本操作教程通过邮件发给您。

3、培训发票为电子发票，学员缴费后现场扫码填写发票信息，发票发送到学员邮箱，发票内容为“**培训费**”或“**会议费**”。

4、本次培训不提供增值税专用发票，统一开增值税普通发票。

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：招商银行上海晨晖支行

账户：121919707510501

b、现金支付：培训现场可收取现金或刷卡。

七、交通地图

培训地址：

南门地址：江苏省苏州市工业园区东长路 88 号 A2 栋 301 室

西门地址：江苏省苏州市工业园区方中街东 50 米星巴克旁 A2 栋 301 室

【注：建议学员从西门进，离 A2 栋 301 室培训教室较近。】

交通路线参考：

• **苏州园区火车站**

1、【沪宁城铁园区站广场站】上车坐 258 路（星湖首末站北方向），【星湖立交南站】下车，换乘快线 7 号（凤凰城首末站南方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时。

2、打车最短距离约 11 公里，费用约 30 元。

• **苏州站**

1、地铁 4 号线（同里方向）【苏州火车站】上车，【乐桥站】下车换乘地铁 1 号线（钟南街方向），至【南施街站】下车 1 号口出，【园区城管大厦站】上快线 7 号路（凤凰城首末站方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到。全程约 1 小时 10 分钟。



2、 打车最短距离约 21 公里，费用约 55 元。

• 苏州北站

1、【京沪高铁苏州北站】乘坐快线 7 号（凤凰城首末站方向），【凤凰城首末站】下车，步行 350 米到达，全程约 1 小时 30 分钟。

2、 打车最短距离约 22 公里，费用约 60 元。



八、周边住宿(请学员自行预定，费用自理)

1) 宾馆名称：桔子酒店（精选） 0512-62628333（最近）

宾馆地址：江苏省苏州市吴中区港田路南 70 米文化人才公寓 9 楼

注：本酒店为创腾学院协议酒店，预定时说明是参加创腾培训即可享受协议价格。

2) 宾馆名称：汉庭酒店(苏州凤凰新天地店) 0512-62805388

宾馆地址：苏州工业园区南榭雨街 9 号凤凰新天地商业二期 41 幢 103 号

3) 宾馆名称：苏州东沙湖邻里商务酒店 0512-67997868

宾馆地址：苏州工业园区东沙湖路 100 号

4) 宾馆名称：宜必思酒店(苏州工业园区中心酒店) 0512-81879966

宾馆地址：江苏苏州市苏州大道东 292 号(地铁 1 号线南施街站 4 号出口处)

注：以上四个经济型酒店供学员参考。周边住宿非常紧张，提醒学员提早预定住宿。

九、培训班联系人

北京创腾科技有限公司 | 北京·上海·苏州·广州
www.neotrident.com
苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301
电话：(0512) 67509707



创腾科技有限公司市场部

电话：0512-67509707-220(叶小姐)

021-58353866-233 (陈小姐), 13916858963

Email：market@neotrident.com

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



附：培训班课程安排。

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	DMol ³ 简介及其在表面科学和能源领域应用情况讲解
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	一般模型的搭建技巧和 DMol ³ 参数功能介绍 主要内容： 1)一般模型的搭建方法（分子、纳米材料、晶体等结构的获取，分子位置的精确移动，使用测量工具辅助模型搭建等）； 2) DMol ³ 参数功能介绍（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）。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	DMol ³ 在表界面研究中的应用（一） 主要内容：量子力学在矿物加工、腐蚀防护、界面作用研究领域的应用实例讲解。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:45	DMol ³ 在表界面研究中的应用（二） 主要内容：界面模型的搭建和 DMol ³ 在表界面化学性质研究中的应用实例讲解（以矿物、腐蚀防护为实例，操作并讲解计算参数和模型搭建的设置技巧，吸附能和表面能的计算，以及相关性质的计算和分析方法）。
	16:45-17:00	茶歇
	17:00-18:00	课程讨论及答疑
第二天	09:00-10:30	DMol ³ 在化学反应研究中的应用（一） 主要包含：DMol ³ 在化学反应领域的应用实例讲解。
	10:30-10:45	茶歇



10:45-12:00	DMol³ 在化学反应研究中的应用 (二) 主要内容：DMol ³ 在均相化学反应研究中的应用（以分子、多孔材料簇模型、纳米团簇等为操作案例，讲解计算参数的设置技巧，研究化学反应的原理、过渡态的搜索和确认方法，热力学性质的计算等）。	
12:00-13:30	午餐	
13:30-15:30	DMol³ 在化学反应研究中的应用 (三) 主要内容：DMol ³ 在非均相催化化学反应研究中的应用（以碳材料、金属合金和氧化物、负载型催化剂为实例讲解模型搭建的技巧，非均相催化反应计算过程中的方法，计算参数的设置和注意事项等）。	
15:00-15:15	茶歇	
15:15-16:45	DMol³ 在化学反应研究中的应用 (四) 主要内容： 1) DMol ³ 在电化学研究中的应用（以表面电化学反应为实例，介绍研究该类反应的方法，计算参数的设置技巧和注意事项）； 2) 外加电场的使用及对反应影响的案例讲解和操作。	
16:45-17:00	茶歇	
17:00-18:00	课程讨论及答疑	
第三天	09:00-10:30	DMol³ 在新能源研究中的应用 (一) 主要内容：储氢材料研究中的应用实例讲解和操作。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	DMol³ 在新能源研究中的应用 (二) 主要内容：锂电池研究中的应用实例讲解和操作。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	DMol³ 在新能源研究中的应用 (三) 主要内容：太阳能电池材料研究中的应用实例讲解和操作。
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-16:45	DMol³ 在新能源研究中的应用 (四) 主要内容：燃料电池材料研究中的应用实例讲解和操作。
		DMol³ 在材料、化学中的应用总结与讨论
	16:45-17:00	茶歇
17:00-18:00	课程讨论及答疑	

