

2019 年培训班

Materials Studio 在 高分子材料中的应用及解决方案

培训通知

课程时间: 2019 年 12 月 17-20 日 (周二至周五)

培训主题: **Forcite plus、Amorphous Cell、Mesocite (DPD)等模块**

特邀讲师: 付一政 副教授

课程地点: 苏州创腾科技培训中心

详细地址: 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、讲师简介

付一政, 博士, 副教授, 九三学社社员, 山西省塑料行业协会专家委员。中北大学材料科学与工程学院、高分子材料科学与工程专业负责人, 山西省高等学校 131 领军人才。主要从事高分子材料多尺度模拟及高分子材料成型加工方面的教学和科研工作, 主持高等学校博士学科点专项科研基金, 山西省青年科学基金、太原市大学生创新计划和山西省研究生优秀创新项目等多项科研项目, 参研国家自然科学基金、国防 973、863 等各类项目 20 余项; 获山西省科技进步二等奖 1 项, 2 项中国发明专利被授权; 发表学术论文 40 多篇, 其中 SCI、EI 收录 20 余篇。

二、培训主旨

帮助用户熟练和了解经典微、介观模拟方法在 高分子材料中的应用情况, 掌握模拟中各种模型的搭建方法, 并以 **Forcite plus、Amorphous Cell、Mesocite** 等模块在 高分子材料 (聚合物、复合材料、共混体系、界面体系、交联体系) 研究领域 (**阻隔性能、相容性、介观形貌、力学性能、玻璃化转变、交联等性能模拟**) 中的应用为例, 讲解参数设置技巧、结果分析方法、使用过程可能遇到的问题及其解决方案等, 使学员对 高分子材料领域中经典微观、介观模拟方法的使用有更为深刻地理解和提高。

三、培训对象

“Materials Studio 在 高分子材料中的应用及解决方案” 培训班以微介观模拟中 高分子、高分子共混物、碳纳米管 (石墨烯) 增强 高分子材料、交联环氧树脂模型搭建的技巧, 分子模拟和介观模拟中参数的设置, 阻隔性能、相容性、介观形貌、力学性能、玻璃化转变、交联密度等分析应用为核心, 主要针对希望接触和了解微、介观分子模拟的老师和同学, 或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。



四、培训形式

培训过程中在特邀讲师讲解时，所有学员能够上机操作，并有工程师进行现场辅助答疑。

五、培训时间

2019年12月17-20日，9:00~12:00 & 13:30~18:00。

六、培训内容

一、微观、介观模拟概述和模型搭建

- (1) 分子模拟介绍及其在聚合物材料中的应用实例讲解；
- (2) 高分子及碳材料（碳纳米管、石墨烯等）增强高分子材料模型搭建方法及技巧；
 - a. 高分子无定型模型的搭建方法；
 - b. 高分子共混物复杂模型的搭建方法；
 - c. 碳材料（碳纳米管、石墨烯等）增强高分子材料模型的搭建技巧。

二、模拟基本原理和参数选择

- (1) 分子模拟的原理；
- (2) 经典模拟中分子力场的形式和选择；
- (3) 经典模拟中电荷的分配；
- (4) 分子动力学模拟的基本概念；
- (5) Forcite plus参数设置讲解；
- (6) 动力学模拟中的结构弛豫。

三、几种典型算例

(1) 高分子材料阻隔性能的模拟和表征

- a. 分子模型的建立及模拟参数的设置；
- b. 均方位移的获取及分子扩散速率的计算；
- c. 速度自相关函数的获取和分析；
- d. 聚合物自由体积分数的获取和分析；
- e. 通过perl脚本对小分子运动轨迹进行分析；
- f. 聚合物回转半径的获取和分析；
- g. 体系浓度、密度分布的获取和分析。

(2) 高分子共混物相容性的微-介观多尺度模拟研究

- a. 高分子共混模型的建立及模拟参数的设置；
- b. 混合焓、混合熵、吉布斯自由能的计算；
- c. 聚合物玻璃化转变温度的获取和分析；
- d. 键长、键角、二面角的分布/演化分析；
- e. 组分间径向分布函数的分析；



- f. 微观模拟结果与介观输入参数的转化;
- g. 介观模拟结果分析。

(3) 碳材料 (碳纳米管、石墨烯等) 增强热塑性高分子材料力学性能模拟

- a. 碳材料 (碳纳米管、石墨烯等) 增强热塑性高分子材料模型的建立;
- b. 材料力学性质, 体模量、杨氏模量、剪切模量的获取;
- c. 应力-应变曲线的获取;
- d. 材料摩擦性能的计算。

(4) 热固性环氧树脂的分子模拟研究

- a. 预聚物与固化剂分子模型的建立;
- b. 通过Perl脚本构建热固性树脂的交联模型;
- c. 交联环氧树脂玻璃化转变温度的分析;
- d. 交联环氧树脂力学性能分析 (应力-应变曲线、模量等)。

(5) MS与其它软件的结合

- a. MS模型的导出与LAMMPS输入文件的转化;
- b. MS与LAMMPS结合的进行导热、动态力学性能等的模拟。

(6) 总结和答疑。

七、课程费用

培训费用 (1人参加)	优惠条件 (满足任一条件即可)
5600/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。
	4800/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。

八、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: 苏州创腾数据科技有限公司

开户行: 招商银行苏州分行

账户: 512907942610802

b、现金支付: 培训现场可收取现金或刷卡。



九、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。



十、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

注: 本酒店目前正在装修, 11 月中下旬方可入住, 请学员注意。

- 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。

十一、培训班联系人

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/>



北京创腾科技有限公司材料科学部

2019年10月25日

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	分子模拟介绍及其在高分子材料中的应用实例讲解
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	软件安装与高分子建模 主要内容：软件在 Windows 和 Linux 操作系统的安装、排队、运行。高分子建模。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:00	聚合物、复合材料、共混体系、界面体系、交联体系模型搭建方法及技巧 主要内容：Amorphous Cell 参数设置讲解；高分子无定型模型的搭建方法；高分子共混物复杂模型的搭建方法。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:45	聚合物、复合材料、共混体系、界面体系、交联体系模型搭建方法及技巧 主要内容：碳材料（碳纳米管、石墨烯等）增强高分子材料模型的搭建技巧。
	16:45-17:00	茶歇
	17:00-18:00	课程讨论及答疑
第二天	09:00-10:30	模拟基本原理 主要内容：分子模拟的原理；经典模拟中分子力场的形式和选择；分子动力学模拟的基本概念；分子动力学模拟结果分析。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	模拟参数选择 主要内容：Forcite plus 参数设置讲解；动力学模拟中的结构弛豫。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	高分子材料阻隔性能的模拟和表征 主要包含：分子模型的建立及模拟参数的设置；均方位移的获取及分子扩散速率的计算；速度自相关函数的获取和分析；聚合物自由体积分数的获取和分析。
	15:00-15:15	茶歇
	15:15-16:45	高分子材料阻隔性能的模拟和表征 主要包含：通过 perl 脚本对小分子运动轨迹进行分析。聚合物回转半径的获取和分析；体系浓度、密度分布的获取和分析。
16:45-17:00	茶歇	



	17:00-18:00	课程讨论及答疑
第三天	09:00-10:30	高分子共混物相容性的微-介观多尺度模拟研究 主要内容：高分子共混模型的建立及模拟参数的设置；混合焓、混合熵、吉布斯自由能的计算；聚合物玻璃化转变温度的获取和分析；键长、键角、二面角的分布/演化分析；组间径向分布函数的分析。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	高分子共混物相容性的微-介观多尺度模拟研究 主要内容：微观模拟结果与介观输入参数的转化；介观模拟结果分析。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	碳材料（碳纳米管、石墨烯等）增强热塑性高分子材料力学性能模拟 主要内容：碳材料（碳纳米管、石墨烯等）增强热塑性高分子材料模型的建立；材料力学性质，体模量、杨氏模量、剪切模量的获取。
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-16:45	碳材料（碳纳米管、石墨烯等）增强热塑性高分子材料力学性能模拟 主要内容：应力-应变曲线的获取；材料摩擦性能的计算。
	16:45-17:00	茶歇
	17:00-18:00	课程讨论及答疑
第四天	09:00-10:30	热固性环氧树脂的分子模拟研究 主要内容：预聚物与固化剂分子模型的建立；通过 Perl 脚本构建热固性树脂的交联模型。
	10:30-10:45	茶歇
	10:45-12:00	热固性环氧树脂的分子模拟研究 主要内容：交联环氧树脂玻璃化转变温度的分析；交联环氧树脂力学性能分析（应力-应变曲线、模量等）。
	12:00-13:30	午餐
	13:30-15:30	MS 与其它软件的结合 主要内容：MS 模型的导出与 LAMMPS 输入文件的转化；
	15:30-15:45	茶歇
	15:45-16:45	MS 与其它软件的结合 MS 与 LAMMPS 结合的进行导热、动态力学性能等的模拟。
	16:45-17:00	茶歇
	17:00-18:00	课程讨论及答疑

