

2020 年 Forcite 高级培训班

——Forcite 在电池膜材料、石油、复合材料领域中的应用

课程时间：2020 年 5 月 28-31 日 (周四~周日)，共四天

课程地点：**在线授课**

一、培训主旨

本次高级培训班课程涵盖复杂模型搭建；Forcite 参数意义、设置技巧及注意事项；Forcite 在电池膜材料、石油以及复合材料领域中的应用；从结构、热力学、动力学等角度分析相关机理；并且结合脚本的运用；使得体系计算更加便捷、高效。培训本着“理论结合实践、学以致用”的原则，为广大学员提供分子模拟计算的深入体验。

二、培训内容

一、分子模拟概述与模型搭建

- (1) 分子模拟概述
- (2) 复杂模型搭建方法与技巧
 - 非周期性模型搭建方法与技巧
 - 周期性多组分模型搭建方法与技巧
 - 界面模型搭建
- (3) 溶液相关模型搭建方法与技巧
 - 球型油滴模型搭建
 - 球型水滴模型搭建

二、经典分子模拟基本原理与参数选择

- 经典模拟中力场的形式与选择
- 电荷分配方法
- 分子力学、分子动力学原理
- Forcite Plus 面板参数的原理与设置
- 动力学模拟中的结构弛豫

三、分子动力学结果参数的提取与分析

- (1) 分子模拟在电池膜材料中的应用
 - 均方根位移的获取与扩散系数的计算
 - 径向分布函数的分析与配位数的计算
 - 材料导热性能的计算



(2) 分子模拟在驱油技术中的应用

- CO₂ 驱油、表面活性剂驱油
- 驱油效果与性能的评价
- 体系组分相对浓度的分布
- Set、find pattern 工具使用获取回转半径与末端距
- 径向分布函数分析体系聚集状态
- 利用脚本提取相互作用能

(3) 分子模拟在复合材料领域中的应用

- 机械性能体模量、剪切模量、杨氏模量的计算
- 脚本对体系的拉伸获取应力应变曲线
- 玻璃化转变温度获取
- 界面结构热力学动力学分析
- 利用脚本拔出体系中纳米材料
- 摩擦性能计算
- 力场编辑
- 超算提交脚本

三、培训对象

Forcite 培训班以复杂模型搭建、深层次的软件应用为核心，主要针对已初步掌握软件操作，以及想进一步提高软件使用水平的科研人员。

四、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。

五、培训时间

2020 年 5 月 28~31 日 9:00~12:00 & 14:00~17:00。

六、课程费用

培训费用 (1 人参加)	优惠条件 (满足任一条件即可)
3700/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。
	3100/人

注：1、培训费包含 **100 元** 邮寄纸质版教材的费用。

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。

七、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、微信或支付宝支付：请加工作人员微信 18761873335 并备注“参加培训”。

八、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)，18761873335

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
2020年3月27日



附：培训班课程安排。

日期	时间	第一部分：Forcite plus 入门学习	
		Visualizer 界面	内容
第一天	09:00-10:00	分子模拟概括与模型搭建	分子模拟概述 软件设置（硬件加速设置、隐藏文件、后缀） 非周期性模型的搭建方法
			替换、旋转、平移、复制、粘贴技巧
	10:00-10:30	休息及在线讨论答疑	
	10:30-11:30	模型搭建	单一聚合物模型的搭建 多组分聚合物模型搭建 界面复合模型搭建
	11:30-12:00		在线讨论答疑
	12:00-14:00	午休	
	14:00-14:30	复杂模型的搭建	纳米材料构型的调整 复合材料模型搭建
	14:30-15:00		溶液相关模型的设计： 油滴模型 水滴模型
	15:00-15:30	休息及在线讨论答疑	
		第二部分 分子力学与分子动力学原理	
		Forcite 模块	内容
	15:30-16:30	分子动力学原理与参数设置	力场的形式和选择 力场参数与电荷的分配 面板参数的原理 参数的设置
	16:30-17:00		在线讨论及答疑
日期	时间	第二部分 分子力学与分子动力学原理	
		Forcite 模块	内容
第二天	09:00-10:00	分子动力学原理与参数设置	分子力学与分子动力学 系综、控温、控压方法 时间步长
	10:00-10:30		休息及在线讨论答疑
		第三部分 Forcite 模块在膜材料与驱油领域中应用	
	10:30-11:30	电池膜材料研究	相关案例介绍 离子交换膜性能评价 粒子的动力学性质实例操作分析
	11:30-12:00		在线讨论答疑
	12:00-14:00	午休	
	14:00-15:00	电池膜材料研究	径向分布函数分析---配位数的获取



			膜材料的导热性质分析
	15:00-15:30	休息及在线讨论答疑	
	15:30-16:30	驱油领域中的应用	相关案例介绍 CO ₂ 驱油、表面活性剂驱油 驱油剂性能评价 油水界面结构---相对浓度分布
	16:30-17:00	在线讨论答疑	
日期	时间	第三部分：Forcite 模块在膜材料与驱油领域中应用	
		Forcite 模块	内容
第三天	09:00-10:00	驱油领域中的应用	原油溶解性能---回转半径实例操作分析 原油溶解性能---末端距离实例操作分析
	10:00-10:30	休息及在线讨论答疑	
	10:30-11:30	驱油领域中的应用	原油溶解状态---能量参数的获取与分析 相互作用能脚本提取实例操作 原油溶解状态---径向分布函数实例操作分析
	11:30-12:00	在线讨论答疑	
	12:00-14:00	午休	
		第四部分：Forcite 在复合材料研究中的应用	
	14:00-15:00	纳米复合材料	纳米复合材料案例介绍 材料机械性能计算：体模量、杨氏模量、剪切模量的实例操作 拉伸力学性能研究---脚本获取应力应变曲线实例操作
	15:00-15:30	休息及在线讨论答疑	
	15:30-16:30	纳米复合材料	玻璃化转变温度获取
	16:30-17:00	在线讨论答疑	
日期	时间	第四部分：Forcite 在复合材料研究中的应用	
		Forcite 模块	内容
第四天	09:00-10:00	纳米复合材料	界面热力学与动力学性能分析 界面结构分析
	10:00-10:30	休息及在线讨论答疑	
	10:30-11:30	纳米复合材料	脚本实现纳米材料拔出模拟实例操作 界面剪切力分析 复合材料耐摩擦性能
	11:30-12:00	在线讨论答疑	
	12:00-14:00	午休	
	14:00-15:00	力场	力场编辑
	15:00-17:00	MS 连接服务器 超算提交脚本 在线讨论答疑	



Driven
Innovation
Quality

北京创瞻科技有限公司 | 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

