

2020 年高分子材料研究中的分子模拟解决方案培训班

课程时间：2020 年 8 月 13-16 日，共四天

培训主题：**1. 高分子材料的微观模型搭建；**
2. 高分子关键性能的微观模拟、计算与分析。

特邀讲师：付一政副教授

课程地点：**在线授课（课程结束后开放一个月视频回看）**

一、讲师简介

付一政，博士，副教授，九三学社社员。中北大学材料科学与工程学院、高分子材料科学与工程**专业负责人及学科管理部副主任**，山西省高等学校 131 领军人才，主要从事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、横向合作课题等 10 多项科研项目；
- 主编《聚合物加工工程》网络试题库一部；
- 参研国家自然科学基金项目、国防 973 项目，军品配套等各类项目 20 余项；
- 作为骨干成员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。

作为 Materials Studio 软件的资深用户和创腾科技长期合作特邀讲师，近年来已成功举办多次 Materials Studio 软件在材料领域应用（微观以及介观）的专题培训，超过 200 人次。课程中丰富详实的理论讲解以及针对性极强的案例实操，能够帮助参训学员快速掌握并建立分子模拟思维，选择合适的方法和参数解决实际科研问题。付老师凭借其在高分子材料多尺度分子模拟领域超过 15 年的丰富项目实战与教学科研经验，帮助往期参训学员很好地解决了许多模拟与科研中遇到的困惑，得到了软件初级用户和进阶用户的一致好评。

二、培训主旨

1. 了解和熟悉各种分子模拟方法的原理、参数逻辑和设置策略；
2. 掌握高分子及纳米增强高分子材料的微观模型构建方法；
3. 掌握各种分子模拟方法在材料关键性能研究中的应用思路和实战技巧；
4. 解答模拟方法在使用中可能遇到的种种问题；

三、培训对象

1. 从事高分子实验研究的科研人员；
2. 分子模拟的进阶使用者，希望进一步了解分子模拟在材料研究中应用技巧的科研人员；
3. 对于分子模拟感兴趣的老师和同学。

四、培训形式

在线授课，培训过程中在工程师讲解时，学员上机操作，并有工程师进行在线答疑。



五、培训时间

2020 年 8 月 13-16 日, 9:00~12:00 & 14:00~17:00。

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高分子材料中的应用实例、思路解析；
- (2) Materials Studio 软件中高分子模型构建工具 Visualizer、Amorphous Cell 的讲解；
- (3) 在 Materials Studio 中搭建高分子及碳材料(碳纳米管、石墨烯等)增强高分子材料模型的进阶技巧讲解；

- 单组分、多组分高分子无定型模型的搭建；
- 纳米复合碳材料模型的搭建；
- 高分子共混介观模型的搭建；
- 交联热固性高分子模型的搭建；

复合材料界面问题与模型设计思路解析。

二、模拟基本原理和软件参数选择：

- 经典分子模拟方法原理讲解；
- Forcite Plus 的参数设置讲解；
- 分子动力学模拟的基本概念；
- 模拟中的几何优化、动力学、退火、淬火任务讲解；

三、典型算例实操：

- (1) **阻隔性能**在分子模拟中的表征方法和原理：

- 通过均方根位移获取扩散系数；



- 均方根位移判断粒子在体系中动力学性质;
- 通过速度自相关函数获取扩散系数;
- 研究高分子孔隙率--自由体积分数的获取和分析;
- 小分子运动轨迹的分析方法;
- 高分子柔顺性--回转半径的获取和分析;
- 相对浓度分布与密度分布的关系;

(2) 相容性在分子模拟中的表征方法和原理:

- 混合焓、混合熵、吉布斯自由能的计算;
- 玻璃化转变温度与键长、键角、二面角、扩散系数等影响参数的关系;
- 组分内与组分间径向分布函数的分析--配位关系;
- 跨尺度模拟的参数转化和传递--获取介观模拟输入参数;
- 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:

- 体模量、杨氏模量、剪切模量、泊松比等力学性质的获取;
- 应力-应变曲线的获取和分析:

① 通过应力获取应变;

② 通过应变获取应力。

- 材料摩擦性能的微观模拟方法、原理以及结果的分析;
- 复合材料界面热力学与动力学性质的分析。

(4) 环氧树脂的分子模拟研究

- 模拟环氧树脂交联的思路与方法;



- 交联脚本主要参数的讲解;
- 预聚物与固化剂分子模型的建立与脚本参数的修改;
- 交联模型的构建。

(5) Materials Studio 与其它软件的结合使用:

- 模型的导出与 LAMMPS 输入文件的转化;
- Materials Studio 与 LAMMPS 结合进行导热性能、动态力学性能等模拟。

(6) 总结和答疑。

七、培训费用

由于疫情影响，本次课程为线上直播，并相较去年下调 600 元费用。

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

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:**

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 (行号: 308305008189)

开户行: 招商银行苏州分行营业部

账 户: 512907942610802



九、培训联系人

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/>



创腾科技有限公司材料科学部

2020年6月16日

附件：培训班课程日程安排

AI
Driven
Innovation
& Quality

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



日期	时间	内容
第一天	09:00-10:30	分子模拟介绍及其在材料中的应用实例、计算思路讲解;
	10:30-10:45	休息及在线讨论答疑
	10:45-11:30	Materials Studio软件及其模型构建工具Visualizer、Amorphous Cell的介绍与讲解;
		- Amorphous Cell参数设置讲解; - 高分子无定型模型的搭建; - 高分子共混物复杂模型的搭建;
	11:30-12:00	休息及在线讨论答疑
	12:00-14:00	午休
	14:00-15:00	- 碳材料(碳纳米管、石墨烯等)增强高分子材料模型的搭建; - 界面问题研究中的模型搭建; - 高分子材料介观模型的搭建。
	15:00-15:15	休息及在线讨论答疑
	15:15-16:30	模拟基本原理
		- 分子力学模拟的原理; - 经典模拟中分子力场的形式和选择; - 原子电荷的获取、分配和非键相互作用的处理思路和方法; - 分子动力学模拟的基本概念;
	16:30-17:00	休息及在线讨论答疑
日期	时间	内容
第二天	09:00-10:30	模拟参数
		- Forcite plus 参数意义及设置及其讲解; - 动力学模拟中的结构弛豫。
	10:30-10:45	休息及在线讨论答疑
	10:45-11:30	阻隔性能在分子模拟中的表征方法和原理
		- 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;
	11:30-12:00	休息及在线讨论答疑
	12:00-14:00	午休
	14:00-15:00	阻隔性能在分子模拟中的表征方法和原理;
		- 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; - 通过 perl 脚本对小分子运动轨迹进行分析。
	15:00-15:15	休息及在线讨论答疑
	15:15-16:30	- 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。
	16:30-17:00	休息及在线讨论答疑



日期	时间	内容
第三天	09:00-10:30	相容性在分子模拟中的表征方法和原理
		- 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; - 组分间径向分布函数的分析。
		休息及在线讨论答疑
		相容性在分子模拟中的表征方法和原理-跨尺度模拟的参数转化和传递
		微观模拟结果与介观输入参数的转化
	10:30-10:45	休息及在线讨论答疑
	10:45-11:30	相容性在分子模拟中的表征方法和原理-跨尺度模拟的参数转化和传递
	11:30-12:00	在线讨论答疑
	12:00-14:00	午休
	14:00-14:45	- 自由能密度分析; - 有序度参数分析; - 介观形貌分析;
第四天	14:45-15:00	休息及在线讨论答疑
	15:00-16:30	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
		- 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。
	16:30-17:00	在线讨论答疑
	09:00-10:30	应力-应变曲线的获取和分析;
		材料摩擦性能的微观模拟方法、原理以及结果的分析。
		休息及在线讨论答疑
		热固性环氧树脂的分子模拟研究
		- 热固性高分子空间网络结构搭建的基本原理和思路; - 预聚物与固化剂分子模型的建立; - 利用 Perl 脚本进行热固性树脂的交联模型构建;
	11:30-12:00	在线讨论答疑
	12:00-14:00	午休
	14:00-15:00	- 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）。
	15:00-15:15	休息及在线讨论答疑
	14:00-15:30	Materials Studio 与其它软件的结合
		- MS 模型的导出与 LAMMPS 输入文件的转化; - MS 与 LAMMPS 结合的进行导热、动态力学性能等的模拟。
	15:30-17:00	总结及在线讨论答疑

