

2020 年量子力学模块 DMol³ 经典培训通知

材料的结构、性能、加工和使用状况这四个因素被称为材料科学四要素。四要素关系的核心是结构和性能的关系。传统材料研究以实验为主，是一门实验学科。随着材料性能要求的不断提高，材料科学对高端测试技术和测试手段的依赖程度也不断提高，研究难度和研发成本大幅度增加，仅凭传统实验已难于满足现代新材料研究的需要。分子模拟是一种基于各种物理模型，并依靠计算机技术，从电子、原子、分子层面，模拟、预测和解释材料性能的科学研究方法。近年来，基于密度泛函理论的第一性原理计算，同经典分子动力学、蒙特卡罗方法相结合，在材料设计、合成、模拟和评价方面都取得了令人瞩目的成果。作为实验方法的辅助手段，分子模拟因其独有的高效率和低成本，越来越受到实验科学家的青睐，在很多的材料体系研究中已然成为必不可少的研究手段。

作为分子模拟中最重要的部分，量子化学能够利用量子力学基本原理处理化学和材料科学相关的问题，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进行解析，帮助研究人员理解实验现象，解释作用机理，模拟光谱特征，评价材料性能，辅助推动新型材料的开发和设计。

Materials Studio 中的 **DMol³ 模块** 基于原子轨道线性组合的密度泛函原理(DFT)，结合高效的数值轨道基组，尤其擅长处理大体系量化计算，表界面化学反应及化学行为等相关问题。相比于基于平面波的传统第一性原理方法，具有更高的开放体系计算效率和更便捷的化学反应处理方法。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、锂电池、燃料电池、太阳能电池、低维材料等复杂体系的原子层级理解提供了可行的解决方案。

为了解决现阶段量子化学计算日益增长的应用需求和众多实验研究人员及初涉量子化学计算人员入门上手困难的矛盾。针对研究人员刚刚接触分子模拟时所普遍遇到的耗费时间计算却得不到正确结果，已获得计算结果但对数据分析和数据使用无从着手的问题；以使用分子模拟计算解决实际问题为目标，结合量子力学计算的实际应用和案例重现，开设 2020 年度 DMol³ 模块经典培训班培训课程，主要面向对象为具有一定 DMol³ 模块使用基础的科研人员。

课程时间：2020 年 12 月 15-18 日 (周二~周五)，共四天

课程地点：在线授课 (课程结束后开放一个月视频回看)

一、培训主旨

DMol³ 经典模拟培训课程旨在帮助学员熟悉和掌握基于 DMol³ 的量子力学计算方法。以纳米材料、均相和非均相化学反应等领域中已发表的研究工作为例，讲解 DMol³ 的参数设置技巧，高精度计算功能实现方法、化学反应相关计算任务的使用方法、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、全面的了解和掌握 DMol³ 模块的应用领域、功能特点和参数设置技巧，在 DMol³ 模块的使用方面有更为深刻地理解和提高。



二、培训对象

DMol³ 经典模拟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，有条件的学员能够上机操作，并有工程师进行在线答疑。

四、培训时间

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

五、课程费用

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。

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：**

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



七、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11月4日

附：培训班课程安排。

AI
Driven
Innovation
& Quality



日期	时间	第一部分：Materials Studio 高级模型搭建	
		Visualizer 界面	内容
第一天	09:00-10:00	高级模型搭建	➢ DMol³ 应用案例讲解 ➢ Miller Plane ➢ 搭建团簇模型
	10:00-10:30	休息及在线讨论答疑	
	10:30-11:30	高级模型搭建	➢ 复杂纳米管搭建 ➢ 分子位置的精确移动 ➢ 使用测量工具辅助模型搭建
	11:30-12:00	在线讨论答疑	
	12:00-14:00	午休	
	14:00-14:30	高级模型搭建	➢ 复合材料界面模型搭建 ➢ 溶剂化模型环境
	14:30-15:00		➢ 显性溶剂层的选取 ➢ 复杂反应环境的处理
	15:00-15:30	休息及在线讨论答疑	
		第二部分 DMol ³ 模块的基本原理及参数意义	
		DMol ³ 模块	内容
第二天	15:30-16:30	DMol ³ 参数和功能使用技巧	➢ 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
	16:30-17:00	在线讨论及答疑	
		第二部分 DMol ³ 模块的基本原理及参数意义	
		DMol ³ 模块	内容
	09:00-10:00	DMol ³ 参数和功能使用技巧	➢ 关键字的设置和应用方法 ➢ 高精度计算的案例操作（基组重叠误差 BSSE 修正、DFT+D 修正等）
第二天	10:00-10:30	休息及在线讨论答疑	
		第三部分 DMol ³ 中在纳米材料领域中的应用	
	10:30-11:30	复合纳米材料	以复合纳米材料（表界面、掺杂对纳米材料性质的影响）为主 ➢ 案例讲解 ➢ 操作：纳米线结构与电子性质计算 ➢ 计算要点剖析
	11:30-12:00	在线讨论答疑	



	12:00-14:00	午休	
	14:00-15:00	复合纳米材料	能带，态密度。 ➤ 操作：壳核纳米结构的电子性质计算 ➤ 计算要点剖析
	15:00-15:30	休息及在线讨论答疑	
	15:30-16:30	纳米碳材料	以纳米碳材料（碳材料，弱相互作用的处理）为主要操作案例，讲解计算参数和模型搭建的设置技巧，外加电场使用，布居，透射系数、伏安曲线等输运性质的计算等。 ➤ 能带路径的调控 ➤ 操作：双层结构的能带调控 ➤ 操作：输运性质计算 ➤ 计算要点剖析
	16:30-17:00	在线讨论答疑	
第三天	日期	第四部分：DMol ³ 在化学反应中的应用（一）	
		DMol ³ 模块	内容
	09:00-10:00	DMol ³ 在催化领域的应用实例讲解及需要解决的问题	➤ 多相催化前沿案例分享 ➤ 深层的相关理论介绍 ➤ 计算参数设置技巧 ➤ 需要解决的问题
	10:00-10:30	休息及在线讨论答疑	
	10:30-11:30	化学反应（一）	以纳米材料(团簇、碳材料)为主要操作案例，讲解计算参数的设置技巧，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
	11:30-12:00	在线讨论答疑	
	12:00-14:00	午休	
		第五部分：DMol ³ 在界面研究中的应用（二）	
	14:00-15:00	化学反应（二）	中间体的搜索和确认方法、反应路径的确认、化学反应速率常数、平衡常数的计算方法，使用过程中需要解决和注意的问题，关键词的使用，缺陷体系的研究，化学反应相关物性的表征等。 ➤ 操作：水在石墨烯上的裂解 ➤ 操作：缺陷石墨烯表面的吸附和分解 ➤ 吸附能计算
	15:00-15:30	休息及在线讨论答疑	
	15:30-16:30	化学反应（二）	➤ 电荷分布转移分析 ➤ HOMO-LUMO 分析 ➤ 能带态密度分析



	16:30-17:00	在线讨论答疑	
第四天	日期	第六部分：DMol ³ 在材料表面研究中的应用（三）	
		DMol ³ 模块	内容
	09:00-10:00	化学反应（三）	以金属、合金、金属氧化物为实例讲解计算过程中的注意事项、特别计算参数的设置，吸附能、表面能等的计算，反应过程的研究方法等 ➤ 操作：催化剂表面反应 ➤ 部分频率分析 ➤ 操作：催化剂表面解离 ➤ 表面能计算
	10:00-10:30	休息及在线讨论答疑	
	10:30-11:30	化学反应（三）	➤ 团簇反应中的应用 ➤ 操作：团簇上的吸附和解离 ➤ 案例讲解 ➤ 操作：金团簇上的水的氧化反应
	11:30-12:00	在线讨论答疑	
	12:00-14:00	午休	
	14:00-15:00	化学反应（三）	➤ 化学反应速率的计算 ➤ 反应动力学 ➤ 疑难问题解决方案 Q&A
	15:00-16:00	DMol ³ 在材料、化学中的应用总结与讨论	➤ 模型搭建总结 ➤ 参数设置总结 ➤ 计算技巧总结 ➤ QMERA 模块介绍 ➤ DFTB+ 模块介绍
	16:00-17:00	在线讨论答疑	

