

北京泰科科技

高精度量子化学计算软件 Molpro 讲习班通知

(2012 年度第一期)

为进一步推广高精度量子化学计算软件 Molpro 的使用，**Molpro 中国地区指定代理商北京泰科科技**，将于 2012 年 6 月 9 ~ 10 日在北京泰科博思科技有限公司举办 2012 年度第一期 Molpro 讲习班。

Molpro 软件以高精度计算为重点，通过采用多组态相互作用方法(MRCI)、耦合簇方法(CC)、及其它相关方法，准确处理电子相关性问题。最新开发的耦合簇方法使得 CCSD (T) 的计算结果在相近的基函数前提下得到与 double-z 和 triple-z 基函数相等的精度，因此实现了在相同的计算标准下减少 2 个数量级计算量的目标。采用局域电子相关方法可进行大分子体系准确的从头计算。这种新方法通过采用确定相关作用项，不仅降低了基函数截断半径导致的误差还降低了局域近似误差。Molpro 的核心部分是多组态 SCF、多参考态 CI 和耦合簇子程序，并且伴随有全基函数特征支持。

本次培训将邀请 Molpro 开发团队成员 —— 毕业于德国斯图加特大学 Werner 教授研究组的刘宇博士和有着多年高性能计算软件技术服务经验的北京泰科科技技术总监郑宏博士担任主讲教师。

北京泰科科技是 Molpro 在中国地区的代理商，与 Molpro 开发组有着良好密切的合作关系。泰科科技的核心团队由有多年行业背景和工作经验的技术、销售、管理人员组成，以“重诚信、珍情谊、求创新、负责任”为主要经营理念，致力于为我国科研工作者提供最先进的软件和最优质的技术支持与服务。

- **主讲教师：**刘宇博士——Molpro 开发团队成员
郑宏博士——北京泰科科技技术总监
- **培训内容**
 - Molpro 简介：Molpro 的安装与运行；建立 Molpro 输入文件；Hartree-Fock 方法；轨道的局域化；轨道的输出和轨道图像的绘制。
 - 通用波函数电子相关方法：闭壳层和开壳层微扰论和耦合簇方法；correlation-consistent 基组和基组外推；高级输入控制
 - 密度泛函理论：Kohn-Sham 计算，泛函，库仑项和交换项的密度拟合技术(density fitting)
 - 几何构型优化和振动频率：几何构型优化，平衡态结构，过度态，反应路径，振动频率，热力学性质
 - 多参考态电子相关方法：多参考态方法介绍：MCSCF/CASSCF, CASPT2, MRCI; 尺寸外推自洽的电子相关方法和 ACPF
 - 激发态，激发能，过度性质：CIS, CC2, EOM-CCSD; 激发态 (态平均 MCSCF, CASPT2, MS-CASPT2, MRCI); 过度性质和梯度
 - 显式相关方法：MP2 和 CC 中的 R12 和 F12 方法
 - 局部电子相关方法：局部相关近似；局部相关在 MP2, CC2 和 CCSD (T) 中的应用，局部相关和显式相关方法的结合



- 相对论效应和赝势: 标度相对论效应的赝势计算, Douglas-Kroll 计算, 有效核势, 旋轨耦合
- 分子内相互作用: 基组重叠误差, 平衡校正; 局部相关方法
- Exercise:
熟悉 Molpro; 绘图; 电子相关方法, 基函数; 密度泛函理论; 几何构型优化和频率, 零点能, 反应熵; 多参考态方法, 分子的离解; 激发态, 性质; 显式相关; 局部相关; 相对论效应; 分子内相互作用

课程全程与上机练习同步, 请自带笔记本电脑。

- **培训时间:**2012 年 6 月 9 日-10 日
- **报名截止时间:** 2012 年 6 月 5 日
- **培训费用:** 1000 元/人, 包括教材费、培训费、上机费、午餐费
- **培训地点:** 北京朝阳区安慧里 4 区 15 号中国五矿大厦 418 室
- **报名方式:** 请按照报名回执表的要求填写, 并将电子版发送到 info@tech-box.com.cn, 我们将在一个工作日之内回复。
- **联系人:** 苗月
电话: 010-51651689-809 手机: 13552957826
E-mail: miaoyue@tech-box.com.cn
- **付款信息**
电汇截止日期 2012 年 6 月 6 日。凭汇款单在签到时领取发票 (发票项目: 培训费), 请在回执中填写正确的发票单位名称。
收款单位全称: 北京泰科博思科技有限公司
开户行名称: 中国建设银行北京北三环支行

账号：11001021200053001224

• 乘车路线：

- 北京首都机场：乘坐机场巴士 5 号线至“小营”站下车，向西步行 500 米即是。下图中“起”点是“小营”站，“终”点是“北京泰科博思科技有限公司”。



- 火车站：

(1) 北京站：乘坐地铁 2 号线，在“雍和宫”站下车，换乘地铁 5 号线（天通苑北方向），在惠新西街北口站下车(A 西北口出)，过地下通道（穿过 4 环），详细步行 150 米即是。

(2) 北京西站：乘坐 301 路(或 673 路, 特 2 路, 83 路),在长椿街路口东站下车，换乘地铁 2 号线，乘坐地铁 2 号线(外环),在崇文门站下车，换成 5 号线(天通苑北方向)，在惠新西街北口站下车(A 西北口出)，过地下通道（穿过 4 环），详细步行 150 米即是。

(3) 北京南站：乘坐地铁 4 号线(安河桥北方向),在宣武门站下车，



换乘地铁 2 号线(外环)(或地铁 2 号线(内环)),在崇文门站下车, 站内换乘地铁 5 号线(天通苑北方向), 在惠新西街北口站下车(A 西北口出), 过地下通道(穿过 4 环), 详细步行 150 米即是。

- 详细地址: 北京朝阳区安慧里 4 区 15 号中国五矿大厦 418 室