**美国Gaussian公司第四届中国理论及应用培训班**

**2016.8.1-5（吉林大学）**

尊敬的各位老师、同学：

大家好！

非常高兴地通知大家，2016年美国“Gaussian软件理论及应用”培训班将于2016年8月1日至5日在吉林大学举办，现已开始接受报名。诚挚邀请全国各大院校、研究所和企业单位的研究人员报名参加。

本次培训班内容如下：

1. 介绍Gaussian软件所有的计算方法。并重点讲解Gaussian的最新方法、最新特性以及在多个研究领域中的应用。
2. 介绍电子结构理论，同时详细讲解Gaussian在当下热点研究领域方面的应用。
3. 介绍能量计算方法、势能面、分子性质。
4. 现场带领大家上机操作Gaussian软件的各类计算方法，同时解决用户在实际使用中遇得到的疑难问题。

注：每位培训学员将获得一套丰富完整的培训资料（一共4本：Workshop notes，Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods最新版（3rd.），User's Reference，IOps ference）

**时间地点**

培训时间：2016年8月1日-5日

培训地点：吉林大学（吉林省长春市前进大街2699号）

**注册费用**

|  |  |
| --- | --- |
| 学员类别 | 培训费用 |
| 学术用户（学生或博士后） | ¥1,800元/人 |
| 学术用户（教师） | ¥3,300元/人 |
| 企业及政府用户 | ¥4,400元/人 |

上述培训费含税，开具发票。培训费用包含培训资料、上机费用、培训午餐、茶歇；住宿费及交通费自理。

**报名方式**

下载报名表填写完整后发送至[custsev@emoltech.com](mailto:custsev@emoltech.com) 。收到报名表后我们会邮件或电话与学员确认报名成功。

**付款时间及方式**

◆报名截止时间：2016年7月1日

◆付款截止时间：2016年7月1日。不接受现场缴费。

◆银行汇款信息：  
户  名：上海绎模信息科技有限公司  
账  号：1001177409200237266  
开户银行：中国工商银行上海曲阳商务中心支行

◆培训费的汇单上请务必注明单位、姓名及“高斯培训班”字样。发票将于报到时统一领取。

◆学术用户（学生或博士后）报到时，需提供学生证等有效证明。

**授课讲师**

[**李晓松 (XiaoSong Li) 教授**](http://depts.washington.edu/ligroup/people/xiaosong-li/)

华盛顿大学化学系教授，Wayne State 大学博士毕业，师从H. B. Schlegel 教授，2012年获得美国化学会计算化学杰出青年奖。目前的研究兴趣集中于：开放量子体系的TD-DFT方法研究、非平衡电子动力学及Ehrenfes分子动力学、蛋白-蛋白相互作用的第一性原理方法研究等。

[**高加力 (Jiali Gao) 教授**](http://jialigao.org/)

明尼苏达大学教授，吉林大学理论化学计算国家重点实验室“千人计划”特聘教授。研究方向：大分子体系的结构和性质，包括蛋白动力学、酶催化、生物分子相互作用、组装以及量子和经典力学方法的开发等。近年来，他的研究方向主要集中于运用量子力学进行动力学模拟来理解酶催化过程。

****

[**Douglas Fox 博士**](http://www.gaussian.com/g_people/doug.htm)

Douglas Fox，计算化学家，毕业于加州大学伯克利分校，师从H.F. Schaefer。目前为高斯公司技术支持总监。[他在Gaussian公司任职21年，一直是help@gaussian.com的发言人。他一直致力于让Gaussian](mailto:他在过去的21年中都是help@gaussian.com的发言人。他一直致力于让Gaussian)的用户能够研究更加广泛的化学领域。

****[**James Foresman 教授**](http://www.gaussian.com/g_people/foresman.htm)

James Foresman，毕业于卡耐基梅隆大学，师从John Pople教授。他是发展第一代激发态计算方法的学者，博士后期间发展了溶剂化模型，目前为York College of Pennsylvania化学系副教授。过去的二十年里，他一直致力于研究现代物理化学（电子结构理论）的方法。他写的<Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods>一书受到广泛的关注，适合各个层次的学者阅读。

**邹琭丰 (Lufeng Zou)博士**

邹琭丰博士，毕业于加州大学洛杉矶分校。主要研究领域为有机反应中的立体选择性。在J. Am. Chem. Soc, J. Org. Chem.等知名杂志上发表多篇学术论文。目前为Gaussian公司的技术支持，主要负责解决中国用户的技术问题。

**授课内容**

**Compute Energies（能量计算）**

* Independent Particle Models （独立粒子模型 (Hartree-Fock, 密度泛函及半经验方法)）
* SCF Convergence and Stability （SCF 收敛及稳定性）
* Electron Correlation Methods （电子相关方法）
* CASSCF （活性空间理论CASSCF）
* Model Chemistry （模型化学）
* Compound Model Chemistries （组合模型化学）
* Using ONIOM （ONIOM方法）
* Solvation （溶剂化）
* Periodic Boundary Conditions （周期性边界条件PBC）

**Explore Energy Landscapes（势能面相关）**

* Geometry Optimization I: Minimization （几何优化 I: 能量最小化）
* Geometry Optimization II: Transition structure optimization （几何优化 II: 过渡态结构优化）
* Reaction Path Following and Dynamics （反应路径追踪及动力学）

**Study Molecular Properties（研究分子性质）**

* Wavefunction and Orbital Analysis （波函数及轨道分析）
* Vibrational Spectroscopy （振动光谱）
* NMR and Magnetic Properties （NMR 及磁性质）
* Chiro-Optical Spectroscopy （手性光谱）
* Optical and UV Spectra （紫外可见光谱）

**Practical Considerations（基础实践）**

* Basics of Running *Gaussian* Calculations （Gaussian计算运行入门）
* Output Files（输出文件）
* Anatomy of a *Gaussian* Input File （输入文件介绍）
* *Gaussian* Utility Programs （Utility 程序: c8609, chkchk, formchk, unfchk, cubegen, cubman, freqchk, freqmem等）
* Computational Considerations （计算时的一般考虑）
* DFT Geometries and Frequencies （几何优化及频率）
* Summary of Standard Methods （标准方法总结）

培训每天会安排上机实验，学员可以通过上机操作完成计算作业，并通过GaussView5简化计算设置及结果可视化。

**墙报交流**

培训现场向学员开设墙报板块，如果您有兴趣，注册时请注明。墙报尺寸：120cm(高)×90cm(宽)。

更多细节请联系 [**Workshop Coordinator**](http://www.gaussian.com/g_ws/em_ws.htm)

上海绎模信息科技有限公司

二O一六年四月八日