



## 第五届 MAPS 多尺度材料及化工过程模拟国际研讨会 暨 MAPS 软件培训体验班 · 上海站

### 邀请函

(2017 年 3 月 28-29 日 · 上海大学)

“第五届 MAPS 多尺度材料及化工过程模拟国际研讨会 · 暨 MAPS 软件培训体验班” —上海站，将于 2017 年 3 月 28-29 日在上海大学举办。我们非常荣幸地邀请到了 MAPS 软件 CEO Dr. Xenophon Krokidis 、上海大学刘轶教授、江苏省建筑科学研究院有限公司的王衍伟博士以及北京泰科科技的郑宏博士作为本次研讨会的主讲。

本次研讨会将以量子力学 (Quantum) 和分子动力学 (Classical&Mesoscale) 为两大主题，分别就 MAPS 在这两个主题中的最新应用和实例操作为重点，分享和交流相关应用成果以及综合性材料设计平台 MAPS (以 LAMMPS/Quantum Espresso/VASP/NWCHEM/TOWHEE 等著名代码为计算引擎的综合材料设计平台) 的基本操作和最新应用。

多尺度材料及化工过程设计平台 MAPS 软件，已经在化学化工、物理电子、材料科学、生物药物等诸多领域的科学研究和工业生产中具有广泛应用，在设计新材料，缩短研发周期，解释实验现象中具有突出优势。本次研讨会同时还提供 MAPS 的体验及使用培训课程，以感受 MAPS 平台带来的强大的功能和高速的工作效率。

· 会议时间:	2017 年 3 月 28-29 日
· 会议地点:	上海市宝山区上大路 99 号上海大学物理系 G309
· 会议费用:	会议免注册费; 免费提供午餐; 住宿费及交通费自理。
· 主办单位:	北京泰科博思科技有限公司、上海大学、Scienomics Sarl.
· 会议报告:	刘轶教授 上海大学 第一性原理计算: 从二维材料到沸石
	王衍伟 高级工程师 江苏省建筑科学研究院有限公司 分子模拟在聚羧酸减水剂产品开发中的应用
	Dr. Xenophon Krokidis Scienomics Sarl. Properties of lithium metal oxide electrodes (Li 金属氧化物电极性质) Modeling properties of graphene – Display & Electrode (石墨烯建模研究 – 显示及电极)
	Understanding hydrogen induced failure at Fe/Fe <sub>2</sub> C interface (理论解释氢引发的 Fe/Fe <sub>2</sub> C 界面失效问题)
	Ab-initio MD simulation of hydrogen transfer in bohemite (从头算分子动力学研究勃姆石中氢扩散)
	Modeling microporous carbon electrode: structural properties and electrolyte / electrode interactions (模拟微孔碳电极: 结构性质和电解质/电极相互作用)
Mechanical and thermal properties of Si/aSiC interface (Si/aSiC 界面热力学性质预测)	
Thermal decomposition of high energetic materials with ReaxFF (ReaxFF 研究高能材料热分解)	

	<p>Selective CO<sub>2</sub> adsorption in polymer membranes ( 聚合物薄膜选择性吸附 CO<sub>2</sub> 行为研究 )</p> <p>Mechanical properties of graphene/epoxy composites ( 石墨烯/环氧复合材料力学性质研究 )</p> <p>Predicting activity of polymerization catalyst using QSPR ( QSPR 预测聚合催化剂活性 )</p> <p><b>详细日程安排请见附件</b></p>
<p>· <b>培训内容:</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· MAPS 平台环境、MAPS 中的工程、模型、作业管理</li> <li>· MAPS 建模课程: 分子,晶体,高分子,无定形物,表面,界面,纳米管,交联结构</li> <li>· MAPS 中的量子力学计算实例课程/分子动力学计算实例课程/QSAR 计算实例课程</li> </ul>
<p>· <b>报名方式:</b></p>	<p>如果您准备参加本次会议, 请将“单位+姓名+Email+电话+MAPS2017SH”信息邮件发送至: info@tech-box.com.cn。例如: 编辑信息: “上海大学+苗月+miaoyue123@shu.edu.cn+18612345678+MAPS2017SH” 发送邮件到 info@tech-box.com.cn.</p> <p>注: 本次培训班控制人数在 30 人, 以报名先后顺序为准。</p>
<p>· <b>联系方式:</b></p>	<p>苗月;13552957826;Email: <a href="mailto:info@tech-box.com.cn">info@tech-box.com.cn</a> 电话: 010-51651689</p>
<p>· <b>温馨提示:</b></p>	<p><b>因有实例操作、软件体验内容, 请自带笔记本电脑, 并请提前联系会务人员安装软件。</b></p>
<p>· <b>电脑配置:</b></p>	<p>CPU: Dual Core Processor 2.0 GHz; 内存:4GB; 显卡:1GB 显存独立显卡; 操作系统: Windows 7, Windows 8, Windows 10, 32 位和 64 位均支持</p>
<p>· <b>交通路线:</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>· <b>公交:</b> 58 路,767A,767B,110,527,727,祁宝线,嘉广线等在锦秋路站下车;</li> <li>· <b>地铁:</b> 乘坐地铁 7 号线(美兰湖方向), 在上海大学站下车(2 口出)</li> </ul> 



附：日程安排

日期	时 间	主讲人	内 容
March 28 <sup>th</sup>	10:00-10:45	刘轶 教授 上海大学	第一性原理计算：从二维材料到沸石
	10:45-12:00	Xenophon Krokidis Scienomics	<b>MAPS 最新应用</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>◆ Properties of lithium metal oxide electrodes ( Li金属氧化物电极性质)</li> <li>◆ Modeling properties of graphene – Display &amp; Electrode ( 石墨烯建模研究 – 显示及电极)</li> <li>◆ Understanding hydrogen induced failure at Fe/Fe<sub>2</sub>C interface ( 理论解释氢引发的Fe/Fe<sub>2</sub>C界面失效问题)</li> <li>◆ Ab-initio MD simulation of hydrogen transfer in bohemite ( 从头算分子动力学研究勃姆石中氢扩散)</li> </ul>
	12:00-13:30	午餐	
	13:30-14:00	郑宏博士 北京泰科科技	<b>MAPS 软件培训及上机</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ MAPS界面介绍</li> <li>➢ 构建分子、晶体模型</li> </ul>
	14:00-14:50	Xenophon Krokidis Scienomics	<b>MAPS 应用实例及上机</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ Influence of Metal Doping on Properties of Li<sub>2</sub>MnO<sub>3</sub> Cathode</li> </ul>
	14:50-15:00	茶歇	
	15:00-16:00	Xenophon Krokidis Scienomics	<b>MAPS 最新应用</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>◆ Predicting activity of polymerization catalyst using QSPR ( QSPR 预测聚合催化剂活性)</li> </ul> <b>MAPS 应用实例及上机</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ QSAR/QSPR Modeling of Ethylene Polymerization Catalysts</li> </ul>
	16:00-16:15	郑宏博士 北京泰科科技	<b>MAPS 建模课程</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ 构建界面模型、表面模型</li> </ul>
	16:15-17:00	Xenophon Krokidis Scienomics	<b>MAPS 应用实例及上机</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ Modeling Hydrogen Adsorption at Fe/Fe<sub>2</sub>C Interface</li> </ul>
	17:00-17:15	Q&A	



日期	时 间	主讲人	内 容
March 29 <sup>th</sup>	9:00-10:00	Dr.Xenophon Krokidis Scienomics	<b>MAPS 最新应用</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>◆ Modeling microporous carbon electrode: structural properties and electrolyte/electrode interactions (模拟微孔碳电极: 结构性质和电解质/电极相互作用)</li> <li>◆ Mechanical and thermal properties of Si/aSiC interface ( Si/aSiC 界面热力学性质预测 b)</li> <li>◆ Thermal decomposition of high energetic materials with ReaxFF ( ReaxFF 研究高能材料热分解)</li> <li>◆ Selective CO<sub>2</sub> adsorption in polymer membranes (聚合物薄膜选择性吸附 CO<sub>2</sub> 行为研究)</li> <li>◆ Mechanical properties of graphene/epoxy composites (石墨烯/环氧复合材料力学性质研究)</li> </ul>
	10:00-10:30	王衍伟 高级工程师 江苏省建筑科学 研究院有限公司	分子模拟在聚羧酸减水剂产品开发中的应用
	10:30-10:40	茶歇	
	10:40-11:00	郑宏博士	MAPS 应用实例及上机 <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ MAPS 建模实例操作 ( 高分子建模、无定形物建模、交联建模)</li> </ul>
	11:00-12:00	Dr. Xenophon Krokidis Scienomics	MAPS 实例操作及上机 <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ Simulating Graphene Epoxy NanoComposite</li> </ul>
	12:00-13:30	午餐&午休	
	13:30-14:30	郑宏 博士 北京泰科科技	<ul style="list-style-type: none"> <li>➢ 冲击波在高能材料中影响:模拟 RDX 爆炸过程 ( ReaxFF )</li> </ul>
	14:30-15:30	Dr. Xenophon Krokidis Scienomics	MAPS 实例操作及上机 <ul style="list-style-type: none"> <li>➢ Studying the adsorption of methane in Na-faujasite using Towhee</li> </ul>
	15:30-15:40	茶歇	
	15:40-16:00	Q&A	



北京泰科科技  
TECH-BOX

申请试用或咨询更多信息  
请点击这里

北京泰科博思科技有限公司

地址：北京市朝阳区安慧里四区中国五矿大厦  
718室

网站：[www.tech-box.com.cn](http://www.tech-box.com.cn)；电话：  
010-51651689



扫一扫，关注北京泰科官方微信

更多相关信息，请关注北京泰科科技网站：[www.tech-box.com.cn](http://www.tech-box.com.cn)