**美国Gaussian公司第三届中国理论及应用培训班**

**2015.8.10-14日（上海）**

尊敬的老师、同学：

大家好！

非常高兴地通知大家，美国Gaussian公司将于2015年8月10日至14日在上海举办为期5天，以“Gaussian理论及应用”为主题的培训班。现已开始接受报名，热烈欢迎全国各大院校、研究所和企业单位的研究人员报名参加。

此次培训班内容将覆盖Gaussian 09 软件所有方法，并将重点介绍Gaussian 09软件中新方法在众多研究领域的应用。培训班将对电子结构理论进行介绍，重点讲解能量计算、势能面理论、分子性质计算以及用户在实践中碰到的问题等。

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，User's Reference，IOps Reference和Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods）**

**时间地点**

培训时间：2015年8月10日-14日

培训地点：上海市黄河路333号二楼A教室（帝柯碧会议中心）

交通：地铁一号线新闸路站5号出口

**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](http://www.gaussian.com/g_ws/china-15-sa.pdf)填写完整后发送至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：2015年7月17日

◆付款截止时间：2015年7月18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。

**住宿推荐**

点击此处获得相关信息。 住宿费用由学员自行承担.

**授课讲师**

|  |  |
| --- | --- |
| **讲师** | **简介** |
| Dr. Douglas J. Fox | Gaussian公司技术总监，help@gaussian.com主要幕后工作者。 |
| Dr. James B. Foresman | York College of Pennsylvania教授, Gaussian软件开发者之一，《Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods》作者。 |
| Dr. George A. Petersson | Wesleyan University教授，Gaussian的开发者之一。 |
| Dr. Lufeng Zou | Gaussian公司技术支持，cnhelp@gaussian.com主要幕后工作者，负责中文技术服务。 |

 **授课内容**

Monday（2015.8.10）

* Introductions
* Potential Energy Surfaces
* Geometry Optimization I: Minima
* Vibrational Spectra & Thermochemistry
* Geometry Optizations II: Transition States
* Hartree-Fock
* Basis Sets

Tuesday（2015.8.11）

* Electron Correlation
* Density Functional Theory
* Semi-Empirical & Molecular Mechanics
* Wavefunction Analysis
* Model Chemistries

Wednesday（2015.8.12）

* ONIOM
* Input Files I
* Output
* NMR
* Chiroptical Spectroscopy
* Optical & UV Spectra

Thursday（2015.8.13）

* Solvation
* Input Files II
* *Gaussian* Utility Programs
* Computational Considerations
* Resources
* Summary

Friday - Advanced Topics（2015.8.14）

* CASSCF
* Periodic Boundary Conditions
* SCF Convergence & Stability
* Dynamics & Reaction Paths

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一五年五月二十日