**Amsterdam Modeling Suite (AMS)培训**

主讲人：刘俊

简介：费米科技量子化学计算专家，毕业于北京大学化学与分子工程学院，师从量子化学家刘文剑教授，从事密度泛函等计算化学理论研究。从2010年担任Amsterdam Modeling Suite计算化学技术支持以及相关研究工作。

培训内容简介：

•1，Amsterdam Modeling Suite (AMS)功能介绍

•2，AMS基本操作

基本操作流程

生成的文件

out与logfile的阅读

t21文件生产图、谱

•3，分子、团簇的DFT计算

DFT理论与数据的对应

ADF参数详解：简单计算案例

ADF计算功能练习

a 能量分解分析：EDA

b 共价键成键分析方法：ETS-NOCV

c 分子间载流子迁移

d 谱：红外（热力学性质）、紫外/可见、NMR、ESR

e 激发态结构优化：单重态、三重态的优化

f 相对论与自旋轨道耦合的理论

g 自旋轨道耦合矩阵元的计算与荧光、磷光辐射跃迁寿命

h 势能面扫面与过渡态搜索

i 激发态的频率计算与过渡态搜索

培训时间和地点： 7月10日 下午 15:30-18:00 讲座 （石先楼报告厅）

7月11日 上午 09:00-11:30 答疑 （化学北楼207）

7月11日 下午 14:00-17:30 讲座 （石先楼报告厅）