**必读！！必读！！必读！！**

大家选择适合自己计算需求的对接单，填写清楚自己的需求，越详细越好。

**第一性原理**——主要针对晶体类等**周期性体系**相关性质的计算（对应的软件主要包括**VASP，MS**等）

**量子化学**——主要针对分子、团簇等**非周期性体系**相关性质的计算（使用的软件主要包括**Gaussian，ORCA**等）

**分子模拟**——主要针对生物、药物、材料的**分子动力学**等相关计算（使用的软件包括**Gromacs，Lammps**等）

**说明：以上分类不是明确的界限，只是为了做出最明显的区分。**

**大家填写需求的时候根据自己的实际计算要求选择填写。**

**如果找不到合适的对接单，任选其一即可，但是需要把需求描写清楚！！！**

除了对接单，另外找至少3篇和自己要计算的类似体系的有计算内容的参考文献，同时需要提供要计算体系的结构文件（如晶体结构的cif文件，非晶体结构式cdx文件等）。**对接单、文献、结构文件**一起打包上传或者直接发送给相关负责的老师即可。

**另说明（请务必阅读）：**

1. 计算内容仅针对对接单填写的具体要求或者按计算方案进行的具体计算，不包括为达客户要求需要尝试的其他探索；如果客户需要，请具体沟通。新的尝试和探索，算作新的需求，另收费。

2. 结果仅包括计算结果，以及对计算部分的说明，不包含分析以及英文写作；如果需要分析，请具体沟通后确认是否可以。分析另收费。如论文需要润色，另有润色服务可以提供，有需要单独沟通。

3. 客户提出的具体要求和模型或者最后经客户确定的计算方案，如果计算出来的结果没有达到客户要说明的目的，此时，仍需正常付费。如果需要其他想法的探索，需另行收费。

4. 所有沟通过程中，请客户不要以“我又不懂计算”或“计算老师是专业的，他应该怎样怎样。。。”作为理由，推脱自己的责任，把所有责任推给计算老师。（计算仅针对客户提出的具体要求进行，对于客户提出的具体要求和模型而得到的计算结果，是否能达到客户想要说明的目的，请客户自己判断）计算老师会对研究内容结合研究经验给出方案，最终要经过客户的认可才开始计算。

5. 计算结果不包含对图片的美化，我们会提供原图，客户可以根据自己的需要，自己打开原图进行编辑以得到自己想要的结果图。

6. 请提供尽可能详细的信息，不要认为你不说的信息，老师都应该能猜到！所有关键信息，请提供！如果不提供影响计算的关键信息，计算老师按着自己的理解去计算，由此导致的结果和费用，请客户自行承担。

**第一性原理计算对接单**

|  |  |
| --- | --- |
| 材料名称及分子式 |  |
| 是否晶体 | □ 晶体 □ 非晶 |
| 研究方向 |  |
| 计算要求（请详细描述） | □ 能带 | □ DOS | □ 活性位 | □ 过渡态 | □ 吸附能 |
| □ 反应路径 | □ 掺杂能 | □ 结合能 | □ 分解能 | □ 反应能 |
| □ 几何性质 | □ 热力学 | □ 其他（请具体填写） |
|  |
| 预期得到的结论或实验结果 |  |
| 结构图/分子式（添加附件） | 能够准确描述物质结构的坐标文件 添加xyz mol pdb gjf cif 等格式附件 |
| 使用方法 | 1. 材料晶型： ，暴露晶面： [ ]，a= ,b= ,c= 。
2. 超胞： \* 。
3. 是否需要固定原子。如是，请说明。
 |
| 目标期刊 | 期刊名称或者IF级别 |  |
| 类别：实验类/计算类 |  |
| 是否需要对计算结果进行分析 |  |
| 期望的周期 |  |
| 期望的软件 | □VASP □MS □无要求 □其他（具体填写） |
| 其他需求 |  |
| 参考文献1-3篇（添加附件） |  |

**量子化学计算对接单**

|  |  |
| --- | --- |
| 课题来源 | □国基金 □省基金 □企业横向 □校创新项目 □研究生课题 □其他 |
| 计算目的 | □ 开题前进行方向（或反应物）筛选（开题筛选）□ 为实验性论文补充数据解释实验不能证明的关键性问题（低保投稿）□ 为实验性论文增加数据量以达到提高文章质量目的（锦上添花）□ 已有相应的计算工作存在，但是被审稿人等专家质疑，需要规范、高精度的计算以及更科学解释 |
| 是否有计算经验 |  |
| 目标期刊 | 期刊名称或者IF级别 |  |
| 类别：实验类 / 计算类 |  |
| 计算体系大小 | □ 普通有机小体系（30原子以下，不含过渡金属）□ 普通有机中等体系（30-100原子，不含过渡金属）□ 普通有机大体系（100以上 不含过渡金属）□ 含过渡金属体系（如金属配合物等，这里区别第一性原理计算） |
| 计算目标物质结构 | 能够准确描述物质结构的坐标文件 添加cdx xyz mol pdb gjf cif 等格式附件 |
| 计算目标 | □ 几何性质：键长键角等□ 电子性质：轨道能级LUMO/HOMO、电子密度等□ 谱图计算：红外、拉曼等□ 光谱特征指认：轨道跃迁、激发类等□ 能量计算：荧光/磷光激发能、核激发能□ 相互作用分析：氢键 卤键 范德华力等（你所期待的计算项目可能对于解决你课题的问题不是最好的选择，请与计算老师沟通后确定最后的计算项目） |
| **具体计算要求****（请详细描述）** |  |
| **预期的计算结论****或实验结果** |  |
| 是否需要对计算结果进行分析 |  |
| 期望计算周期 |  |
| 参考文献1-3篇（添加附件） | 贴出你想要模仿的文章1里面含有你期待的数据呈现形式或者计算套路的文章2与本次计算具有直接联系的文章 |

**分子模拟对接单**

|  |  |
| --- | --- |
| 计算方向 | □生物 □药物 □材料 □其他（具体填写） |
| 计算目的 | □ 开题前进行方向（或反应物）筛选（开题筛选）□ 为实验性论文补充数据解释实验不能证明的关键性问题（低保投稿）□ 为实验性论文增加数据量以达到提高文章质量目的（锦上添花）□ 已有相应的计算工作存在，但是被审稿人等专家质疑，需要规范、高精度的计算以及更科学解释 |
| 是否有计算经验 |  |
| 目标期刊 | 期刊名称或者IF级别 |  |
| 类别：实验类 / 计算类 |  |
| 计算目标物质结构 | 能够准确描述物质结构的坐标文件 添加xyz mol pdb gjf cif 等格式附件 |
| 计算目标 | □多糖分子对接 □生物酶催化计算 □配体与蛋白作用模式□配体释放机制 □蛋白间相互作用 □跨膜运输机制 □同源建模 □药效团识别与虚拟筛选 □其他（请具体描述） |
| 具体计算要求（请详细描述） |  |
| 预期的结论或实验结果 |  |
| 是否需要对计算结果进行分析 |  |
| 期望计算周期 |  |
| 期望的软件 | □GROMACS □DS(Discovery Studio) □Lammps □无要求 □其他（具体填写） |
| 参考文献1-3篇（添加附件） |  |