



纳百家软件 助天下英才

Hongcam Newsletter

创刊号

2008 年第 1 期

2008 年 10 月

Hongcam Newsletter 创刊语

创办宏剑 Newsletter 的目的是为了给北京宏剑公司的用户一个有关我们的信息源。

用简明的形式总结了公司每月的**重要事件**和使用与我们代理软件相关的**最新文献**，实践公司“不断将世界更新更全面的分子模拟软件引入中国，为中国的科研工作者服务”的宗旨。

我们征求您对创刊号的反馈，请发 email 到 nh@hongcam.com.cn。

目 录

一、 企业新闻	1
1. 北京宏剑公司出席 TACC2008 大会	1
2. ADF 培训班即将开班	1
3. MOLPRO 软件培训班顺利结业	2
4. 第四届国际理论化学、分子模拟和生命科学研讨会第一轮通知	3
二、 最新文献	4
1. 量子化学·理论计算	4
2. 材料科学·纳米材料	4
3. 材料科学·磁性材料	5
4. 材料科学·光电子学	5
5. 材料科学·新能源	5
6. 材料科学·表面与催化	6
7. 药物设计与生命科学·分子模拟	6
8. 药物设计与生命科学·分子对接	6
9. 药物设计与生命科学·定量构效关系	6
10. 药物设计与生命科学·ADME/T	6
11. 药物设计与生命科学·分子动力学	7
12. 药物设计与生命科学·生命科学	7



一、企业新闻

1. 北京宏剑公司出席 TACC2008 大会

2008年9月23日，世界各地顶尖理论化学家云集上海，本年度计算化学国际研讨会 (International Conference on Theory and Applications of Computational Chemistry 2008) 在上海市开元大酒店隆重举行。北京宏剑公司秉持“为中国科研工作者服务”的精神，作为此次大会的主要赞助商出席会议。



2. ADF 培训班即将开班

- 一 时间：2008年10月30日--11月1日
培训时间为期3天（包括理论讲课和上机）
- 二 地点：北京宏剑公司培训部，海淀区苏州街18号长远天地A2座3A09
- 三 收费标准：商业用户4000元/人，科研用户2000元/人，ADF用户1500元/人
含学费，上机辅导费，讲义，午餐，茶歇（不包住宿）
- 四 培训对象：已经使用、准备使用或对此软件有兴趣的老师、同学。
- 五 主讲人：北京宏剑公司技术部
- 六 报名电话：010-51261900 转 108（高女士）或 898（陈女士）
- 七 培训的主要内容：
 - 1、ADF2008 入门：
 - 1) ADF2008 新功能介绍与理论基础
 - 2) ADF2008 图形界面：ADF-GUI、BAND-GUI、COSMO-RS
 - 3) ADF2008 计算的输入、输出文件格式以及远程任务管理

主办单位：



Scientific Computing & Modelling



北京宏剑公司





<ul style="list-style-type: none">4) 几何结构优化、过渡态搜寻和频率计算5) 反应路径、势能面扫描6) 波谱分析: 红外、拉曼、紫外/可见、核磁、电子圆二色谱7) QM/MM 计算 <p>2、ADF2008 进阶</p> <ul style="list-style-type: none">1) 开壳层片段 - 键能校正2) 用片段方法分析键能3) 用片段方法进行轨道和能量分析4) 文献实例讲解<ul style="list-style-type: none">* 纳米团簇* 过渡金属配合物与催化* 表面吸附与非均相反应* 晶体结构与能带分析* TD-DFT 与激发态研究* 蛋白质与溶液体系	
---	--

3. Molpro 软件培训班顺利结业

2008年9月21日, 由北京宏剑公司举办的Molpro培训班顺利结业。经过三天的理论授课和上机实习, 培训班的90余名学员基本掌握了Molpro软件的操作流程和各种算法的使用方法, 圆满地完成了各项学习任务。

Molpro是国际上被广泛应用的专业级量化计算软件, 其功能注重对小分子体系的高精度计算。此次北京宏剑公司有幸邀请到Molpro软件的两位创始人H.-J. Werner教授和P. Knowles教授亲自来北京开班授课, 因而开班之前全国各地的理论化学研究人员纷纷踊跃报名, 培训班规模一增再增, 由原来预计的50人逐步增加到90人。

H.-J. Werner教授是国际量子分子科学院(International Academy of Quantum Molecular Science)院士, 并且自1995年以来一直担任*Int. Rev. Phys. Chem.*和*Phys. Chem. Chem. Phys.*等多种期刊的编辑。H.-J. Werner教授对近年来中国科研人员





在理论计算化学领域取得的进展表示赞许，并在培训班结业陈词中祝愿各位学员学有所成、学以致用，共同促进理论计算化学在国内科研领域的普及与发展。

4. 第四届国际理论化学、分子模拟和生命科学研讨会

第一轮通知

**The Fourth International Conference on Theoretical Chemistry,
Molecular Modeling and Life Sciences(ICTCLS'09)**

同期召开第四届北京宏剑公司用户大会

在业内各领域众多专家的大力支持下，第四届国际理论化学、分子模拟和生命科学研讨会将于2009年07月28-31日在吉林大学举行。本次大会由徐光宪院士担任大会荣誉主席，孙家钟院士担任大会主席。前三届研讨会是在2003年和2006、2007年分别于北京和南戴河、烟台等地成功举办。三次研讨会均受到了国内外、港澳台地区广大理论化学及理论生命科学工作者和专家们的热烈响应，前后有几十位院士和业内著名专家学者在内的上千人参加会议，其学术水平之高，和影响力之广，已经得到了与会专家学者及海内外同行的一致认可和赞誉。2009年第四届国际理论化学、分子模拟和生命科学研讨会和北京宏剑公司用户大会再次合并召开，欢迎相关领域的国内外专家学者积极投稿和参加本届会议。

主办单位：



吉林大学



北京宏剑公司





二、最新文献

领域	文献索引		影响因子 (2007)	使用软件
量子化学	理论计算	Dans PD , Crespo A , Estrin DA , et al. Structural and energetic study of cisplatin and derivatives: Comparison of the performance of density functional theory implementations [J]. <i>Journal of Chemical Theory and Computation</i> , 2008 , 4: 740-750.	4.308	Gaussian03
		Levine BG , Coe JD , Virshup AM , et al. Implementation of ab initio multiple spawning in the MOLPRO quantum chemistry package [J]. <i>Chemical Physics</i> , 2008 , 347:3-16.	1.805.	MOLPRO
		Jacob CR , Neugebauer J , Visscher L , et al. Software news and update a flexible implementation of frozen-density embedding for use in multilevel Simulations [J]. <i>Journal of Computational Chemistry</i> , 2008 , 29: 1011-1018.	4.297	ADF
材料	纳米	Kojima S , Hu C . Plastic deformation by synchronized rotation of nanolayers under high stress in metals [J]. <i>Materials Science and Engineering A-Structural Materials Properties Microstructure and Processing</i> , 2008 , 489: 150-157.	1.457	Materials Explorer





科 学	材 料	Zhou LP , Yang SW , Ng MF , et al. One-dimensional iron-cyclopentadienyl sandwich molecular wire with half metallic, negative differential resistance and high-spin filter efficiency properties [J]. <i>Journal of the American Chemical Society</i> , 2008 ,130: 4023-4027.	7.885	ATK
		Li XF , Chen KQ , Wang LL , et al. Effect of length and size of heterojunction on the transport properties of carbon-nanotube devices [J]. <i>Applied Physics Letters</i> , 2007 , 91:133511.	3.596	ATK
		Yan QM , Huang B , Yu J , et al. Intrinsic current-voltage characteristics of graphene nanoribbon transistors and effect of edge doping [J]. <i>Nano Letters</i> , 2007 , 6:1469-1473.	9.627	ATK
	磁 性 材 料	Apinaniz E , Legarra E , Plazaola F , et al. Influence of addition of Si in FeAl alloys: Theory [J]. <i>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</i> , 2008 , 320: E692-E695.	1.704	MedeA
		Chizallet C , Costentin G , Che M , et al. Infrared characterization of hydroxyl groups on MgO: A periodic and cluster density functional theory study [J]. <i>Journal of the American Chemical Society</i> , 2007 ,129: 6442-6452.	7.885	MedeA
		Helman C , Milano J , Steren L , et al. Semiclassical electronic transport in MnAs thin films [J]. <i>Journal of Magnetism and Magnetic Materials</i> , 2008 , 320: E415-E417.	1.704	Wien2K
	光 电 子 学	Charifi Z , Baaziz H , Reshak AH . Ab-initio investigation of structural, electronic and optical properties for three phases of ZnO compound [J]. <i>Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics</i> , 2007 , 245:1455-1470.	1.071	Wien2K





	新 能 源	Yin RZ , Kim YS , Choi W , et al. Structural analysis and first-principles calculation of lithium vanadium oxide for advanced Li-ion batteries [J]. <i>Advances in Quantum Chemistry</i> , 2008 , 54:23-33 .	1.275	MedeA
		Bucko T . Ab initio calculations of free-energy reaction barriers [J]. <i>Journal of Physics-Condensed Matter</i> , 2008 , 20:064211 .	1.886	MedeA
	表 面 与 催 化	Vayner E , Sidik RA , Anderson AB , et al. Experimental and theoretical study of cobalt selenide as a catalyst for O-2 electroreduction [J]. <i>Journal of Physical Chemistry C</i> , 2007 , 111: 10508-10513 .	1.886	MedeA
		Domazetis G , Raoarun M , James BD , et al. Molecular modelling and experimental studies on steam gasification of low-rank coals catalysed by iron species [J]. <i>Applied Catalysis A-General</i> , 2008 , 340:105-118 .	3.166	CAChe
药 物 设 计 与 生 命 科 学	分 子 模 拟	Ingratta M , Duhamel J . Effect of side-chain length on the side-chain dynamics of alpha-helical poly(L-glutamic acid) as probed by a fluorescence blob model [J]. <i>Journal of Physical Chemistry B</i> , 2008 , 112 , 9209-9218 .	4.086	Hyperchem
		Han MJ , Meng XG , Lippincott L . Determination of configuration of arsenite-glutathione complexes using ECSTM [J]. <i>Toxicology Letters</i> , 2007 , 175 , 57-63 .	2.826	Hyperchem
	分 子 对 接	Hartshorn MJ , Verdonk ML , Chessari G , et al. Diverse, high-quality test set for the validation of protein-ligand docking performance [J]. <i>Journal of Medicinal Chemistry</i> , 2007 , 4: 726-741 .	4.895	GOLD
	定 量 构 效 关 系	Xia BB , Ma WP , Zheng B ,et al. Quantitative structure-activity relationship studies of a series of non-benzodiazepine structural ligands binding to benzodiazepine receptor [J]. <i>European Journal of Medicinal Chemistry</i> , 2008 , 43: 1489-1498 .	2.301	CODESSA





AD ME /T 分 子 动 力 学 生 命 科 学	AD ME /T	Khobragade CN , Bodade RG , Shinde MS , et al. Microbial and xanthine dehydrogenase inhibitory activity of some flavones [J]. <i>Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry</i> , 2008 , 23: 341-346.	1.343	Pallas
	分子动力学	Payne RJ , Ficht S , Tang S , et al. Extended sugar-assisted glycopeptide ligations: Development, scope, and applications [J]. <i>Journal of the American Chemical Society</i> , 2007 ,129: 13527-13536.	7.885	Amber
	分子动力学	Vorobyov I , Li LB , Allen TW . Assessing atomistic and coarse-grained force fields for protein-lipid interactions: The formidable challenge of an ionizable side chain in a membrane [J]. <i>Journal of Physical Chemistry B</i> , 2008 , 112 , 9588-9602.	4.086	CHARMM
	生命科学	Pel HJ , de Winde JH , Archer DB , et al. Genome sequencing and analysis of the versatile cell factory <i>Aspergillus niger</i> CBS 513.88 [J]. <i>Nature Biotechnology</i> , 2007 , 25:221-231.	22.848	CLC DNA Workbench
生命科学	Toegel S , Huang WW , Piana C , et al. Selection of reliable reference genes for qPCR studies on chondroprotective action [J]. <i>BMC Molecular Biology</i> , 2007 , 8:13.	3.371	AlleleID(Premier 公司产品)	

这份由北京宏剑公司主管整理的《Hongcam Newsletter 创刊号》很高兴和大家见面。希望得到大家的支持与反馈。

如果您有软件方面有问题请联系我们：

北京市海淀区苏州街18号长远天地大厦A2座四层3A09室

电话:+86-10-51261900 传真:+86-10-82610

邮箱: sales@hongcam.com.cn

