**下单须知（必看）**

1. 提交需求时，请**提供尽可能详细的信息**，如不提供影响计算的参数信息，让老师自己的理解去计算，因此导致的结果和费用，请客户自行承担。

2. 计算结果内容包含：计算部分的说明，结果图（因为计算知识针对实验方面的验证，所以不包括具体的分析）。**如果需要分析，请务必在需求方案中备注注明，以免影响周期。**

3. 客户所要求计算内容，根据双方最终确认的计算方案内容进行计算，所得结果跟计算方案对应。**如有其它思路的参数，需另外沟通“需求”计费。**

4. 计算结果中一般不包括对图片的美化， 因为文献中的图片都是自行处理的，如需得到美化后的图片，可通过软件自行处理。

5. 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得到的结果，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经验给出方案，最终方案要经过客户的认可才开始计算。

6. 针对客户提出的具体要求和模型，即最终经客户确定的计算方案，我们可以保证计算结果的真实性和有效性，但是**无法保证计算结果一定符合您的预期**，请务必确认该风险。。

7. 所有计算结果提供cif等结构文件和作图所需数据文件，如需原始数据，请提前告知。**相关版权问题请自行解决**。

8、交付结果后，**请在一周内反馈结果问题**。长时间不查看结果，结果问题反馈时间距离交付结果时间太久的，我们视情况进行问题的解答（因为源数据不一定还有保留，所以务必要及时反馈）。

9、再次提醒：有不懂的可以多交流，但是交付结果后，请不要以“我不懂计算”为理由，提出不对应原方案的另外的要求，我们最终交付结果均以原方案为核对参考。

**请务必阅读后进行下单！**

**计算委托单**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 委托方 | 委 托 人 |  | 导师（记账课题组） |  |
| 电话 |  | 接收数据邮箱 |  |
| 学校/单位名称 |  | | |

**计算要求**

**1、基本信息**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 物质成份 |  | | |
| 研究方向/应用领域 |  | | |
| 软件要求(\*) | 软件要求：□无要求 □VASP □MS □Gaussian □Lammps  □Comsol □Ansys □其他 \_\_\_\_\_\_\_（版权问题请自行解决） | | |
| 预算费用 | □无要求 □ 元 | 期望周期 | □无要求 □ 天 |

## 2、 计算主要目的（简要描述本次实验的背景、过程及需要解释的实验结果）

## 3、模拟体系的基本信息（提供晶体或分子体系的结构式cif、vasp、pdb格式等）

可在此处截图，附件与任务书一起压缩发送。

## 4、明确计算需求（需要计算的数据及物理量，尽量明确，如不清楚，请指定参考文献中类似的图和内容）

# **5、预期结果（如果对于计算结果有预期或者有对应的实验结果，请具体填写）**

# **6、参考文献（尽量提供几篇和自己所想计算内容类似的文章以及SI文件，可以单独提供pdf文件）**

附件与委托单一起压缩发送。

# **7、其他（若对于结果报告和数据图文有其他要求请先备注）**