

第 10 届北京科音基础量子化学研讨会邀请函

_____同学/老师，

北京科音自然科学研究中心（www.keinsci.com）连同北京科韵科技发展中心将于 2023 年 8 月 20 日至 25 日于北京开办“第 10 届北京科音基础量子化学研讨会”，详情如下

主讲人

卢天

卢天现任北京自然科学研究中心主任，在量子化学、分子模拟、第一性原理领域有长期深入的研究，是国际知名的 Multiwfn 波函数分析程序的开发者。发表 SCI 论文 90 余篇，被引用超过 28000 次。担任 70 余种知名理论、计算化学类期刊审稿人。

会议内容

- 量子力学概要
- 量子化学的理论基础
- 基组
- 单点能的计算与相关问题
- 势能面
- 几何优化
- 过渡态搜索
- IRC 的计算
- 反应速率常数的计算
- 势能面扫描
- 振动分析与红外、拉曼、VCD、ROA 光谱
- 热力学量与能量相关性质的计算
- 弱相互作用的计算
- 溶剂模型与溶剂相关问题
- 几何结构相关的量、外电场、背景电荷、偶极矩与多极矩、超精细耦合、光学旋转
- 磁相关性质计算
- 激发态与电子光谱：理论&计算
- 极化率与超极化率的概念和计算
- 赝势与相对论量子化学初步
- 周期性计算简介
- 分子力学、QM/MM 和 ONIOM 方法的原理与计算
- MOPAC 使用简介
- 量子化学程序盘点

会议时间

2023 年 8 月 20 至 25 日共六天。会议时间为每日 9:00~12:00，13:00~18:00。

报到时间为 8 月 19 日 20:00~20:30，以及 8 月 20 日上午 8:00~8:30，报到时将提供会议资料、邀请函和发票。

会议地点与住宿

本次会议的地点为北京市丰台区冠京饭店。我们不统一安排住宿，会议地点附近有 8 家以上的旅馆，参加者请自行预定住宿。

会议费用

- 学生：2700 元
- 教师：2950 元
- 企业人员：3400 元

费用包含全 6 天的会议费和资料费，不包含食宿和交通费用，食宿和交通自理。费用仅支持汇款方式支付，不支持刷卡和现金支付。

若付款后因故无法参加，8 月 13 日及之前联系我们可以退还 2/3 的费用，8 月 13 日之后将不予以退还，但可以邮寄发票和培训资料。

报名方式

报名开始时间：2022 年 8 月 1 日。

参加本次会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/10KBQC/regform.docx>，填写完整后发送至 keinsci@sina.com。邮件标题统一为“姓名+第 10 届基础量化研讨会报名”。



北京科音自然科学研究中心



北京科韵科技发展中心

2023 年 8 月 1 日