

# 第十一届北京科音初级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 (<http://www.keinsci.com>) 连同北京科韵科技发展中心将于 2020 年 1 月 14 日~17 日于北京举办“第十一届北京科音初级量子化学研讨会”，详情如下

## 主讲人

卢天 & 陈沁雪

卢天现任北京科音自然科学研究中心主任，发表 SCI 论文 50 余篇，被引用约 6500 次，是知名 Multiwfn 波函数分析程序的开发者，对量子化学与分子模拟有长期深入的研究。

陈沁雪现任北京科韵科技发展中心主任，北京科音自然科学研究中心副主任，毕业于香港理工大学，对量子化学特别是反应速率计算问题有长期研究。

## 会议内容

- Ø 计算化学概述
- Ø 计算化学工作者的常识
- Ø 量子化学理论知识简介
- Ø 基组
- Ø 主流量子化学程序的使用基础
- Ø 分子可视化程序的使用与分子结构的构建
- Ø 单点能
- Ø 势能面
- Ø 几何优化
- Ø 过渡态搜索
- Ø IRC 的计算
- Ø 反应速率的计算
- Ø 振动分析与红外、拉曼、VCD 光谱
- Ø 势能面扫描
- Ø 热力学量与能量相关性质的计算
- Ø 溶剂模型
- Ø NMR 的计算
- Ø 激发态与电子光谱：理论&计算
- Ø 计算化学相关书籍简介

## 会议时间

2020年1月14日至17日共四天。会议时间为每日9:00~12:00, 13:00~18:00

报到时间为1月13日19:30~21:00, 以及1月14日上午8:30~8:50, 报到时将提供会议资料、邀请函和发票。

## 会议费用

Ø 学生: 2150元

Ø 教师: 2350元

Ø 企业人员: 2750元

费用包含全4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, 12月26日及之前联系我们可以退还2/3的费用, 12月26日之后将不予以退还, 但可以邮寄发票和会议资料。

## 报名方式

报名开始时间: 2019年12月5日。

欲参加本会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/11KEQC/regform.doc>, 填写完整后发送至 keinsci@sina.com。邮件标题统一为“姓名+第十一届初级量化研讨会报名”。



北京科音自然科学研究中心



北京科韵科技发展中心

2019年12月5日