

## 第十三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连同北京科韵科技发展中心将于 2020 年 10 月 5 日~8 日于北京举办“第十三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 60 余篇，被引用约 9000 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

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

## 会议时间

2020年10月5日至8日共四天。会议时间为每日9:00~12:00, 13:00~18:00

报到时间为10月4日19:30~21:00, 以及10月5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

- 学生: 2200 元
- 教师: 2400 元
- 企业人员: 2800 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, 9月25日及之前联系我们可以退还2/3的费用, 9月25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: 2020年9月5日。

欲参加本会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/13KEQC/regform.doc>, 填写完整后发送至 [keinsci@sina.com](mailto:keinsci@sina.com)。邮件标题统一为“姓名+第十三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

2020年9月5日