

第 20 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 2023 年 12 月 9 日至 12 日于北京举办“第 20 届北京科音初级量子化学研讨会”，详情如下

讲授者

卢天

卢天现任北京科音自然科学研究中心主任，发表 SCI 论文 90 余篇，被引用超过 30000 次，入选 Elsevier 中国高被引学者名单，是国际知名的 Multiwfn 量子化学波函数分析程序的开发者，对量子化学、分子模拟和第一性原理领域有长期深入的研究。

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

2023年12月9日至12日共四天。会议时间为每日9:00~12:00, 13:00~18:00

报到时间为12月8日20:00~20:30, 以及12月9日上午8:00~8:30, 报到时将提供会议资料、邀请函和发票。

会议费用

- 学生: 2350 元
- 教师: 2600 元
- 企业人员: 2900 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1日及之前联系我们可以退还2/3的费用, 12月1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: 2023年11月17日。

欲参加本会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/20KEQC/regform.doc>, 填写完整后发送至 keinsci@sina.com。邮件标题统一为“姓名+第20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

2023年11月17日