

第 2 届北京科音高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 2025 年 10 月 11 日至 14 日于北京举办“第 2 届北京科音高级量子化学研讨会”，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，发表论文一百余篇，被引用超过 6 万次，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

- 密度拟合/RI 与 COSX 技术
- ORCA 程序的使用
- 使用 MRCC 和 e^T 做基态和激发态的高精度耦合簇计算
- 低标度耦合簇方法
- 显式相关计算
- 相对论量子化学
- 约束性 DFT
- 交换-相关泛函的调控
- CASSCF、多参考方法的原理与应用
- 势能面交叉与光化学
- DFTB、GFN 系列方法与 xtb 程序的使用
- 从头算分子动力学
- real-time TDDFT 模拟
- 使用 sTDA 方法快速计算大体系电子光谱
- 振动电子光谱的计算
- 磷光速率的计算
- 内转换与系间窜越速率的计算
- GAMESS-US 的使用基础
- 双光子吸收的计算
- spin-flip TDDFT 方法
- 分子振动问题的高级计算方法
- X 光光谱的计算
- 对角 Born-Oppenheimer 校正 (DBOC) 的计算
- 转动常数的计算

会议内容极其丰富，幻灯片达到约 2000 页。除了会详细讲的 ORCA、xtb、GAMESS-US 量子化学程序外，在部分主题中还会介绍怎么用 MRCC、Dalton、NWChem、 e^T 、CFOUR、Dirac 等程序发挥它们的独家长处计算特定问题。

会议时间

2025 年 10 月 11 日至 14 日共 4 天。会议时间为每日 9:00~12:00, 13:00~18:00。

报到时间为 10 月 10 日 20:00~20:30, 以及 10 月 11 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: 2600 元
- 教师: 2900 元
- 企业人员: 3300 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, 10 月 1 日及之前联系我们可以退还 2/3 的费用, 10 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: 2025 年 9 月 16 日。

欲参加本会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/2KAQC/regform.docx>, 填写完整后发送至 keinsci@sina.com。邮件标题统一为“姓名+第 2 届高级量化研讨会报名”。



北京科音自然科学研究中心



北京科韵科技发展有限公司

2025 年 9 月 16 日