

## 第 2 届北京科音 CP2K 第一性原理计算研讨会邀请函

\_\_\_\_\_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 10 月 6 日至 9 日于北京举办“第 2 届北京科音 CP2K 第一性原理计算研讨会”，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，被引用约 3 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、第一性原理有长期深入的研究。

### 会议内容

- 第一性原理计算概述
- 第一性原理计算的理论基础
- 晶体结构和材料高通量筛选的库
- CP2K 的基础知识
- 能量的计算及相关问题
- 磁性体系的计算
- DFT+ $U$  的计算
- $GW$  的计算
- 结构优化
- 电子结构的分析
- 能带结构和态密度的计算
- 相互作用的计算与分析
- 振动分析与振动光谱
- 热力学量及能量相关属性的计算
- 过渡态搜索与反应路径的产生
- 第一性原理分子动力学模拟
- 分子力学与 QM/MM 计算
- 电子激发与 X 光光谱的计算
- 隐式溶剂模型的使用
- 弹性性质的计算
- NMR 的计算
- 电子  $g$  因子与超精细耦合的计算
- 约束性 DFT 与电子耦合的计算
- 路径积分分子动力学
- 第一性原理程序盘点

- 第一性原理相关书籍

## 会议时间

2023年10月6日至9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5日20:00~20:30, 以及10月6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, 9月28日及之前联系我们可以退还2/3的费用, 9月28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9月10日。

欲参加本会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/2KFP/regform.docx>, 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2届第一性原理研讨会报名”。



北京科音自然科学研究中心



北京科韵科技发展中心

2023年9月10日