

第四届北京科音基础量子化学研讨会邀请函

_____同学/老师,

为了以最好、最快方式提升广大量子化学研究者的研究水平,北京科音自然科学研究中心(www.keinsci.com)将于2018年3月22日至27日于北京开办“第四届北京科音基础量子化学研讨会”,详情如下。

主讲人

卢天 & 陈沁雪

卢天博士现任北京自然科学研究中心主任,发表SCI论文40余篇,被他引3000余次,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

- 量子力学概要
- 量子化学的理论基础
- 基组
- 单点能计算
- 势能面
- 几何优化
- 过渡态搜索
- IRC的计算
- 反应速率常数的计算
- 势能面扫描
- 振动分析与红外、拉曼、VCD光谱
- 热力学量与能量相关性质的计算
- 弱相互作用的计算
- 溶剂模型
- 分子体积、静电势、外电场、原子电荷、键级、背景电荷、轨道成分、多极矩、几何结构相关的量、超精细耦合、g张量、光学旋转
- NMR的计算
- 激发态与电子光谱的计算
- (超)极化率
- 相对论量子化学与赝势
- 周期性计算
- ONIOM方法
- MOPAC使用简介

会议时间

2018年3月22日至3月27日共六天。会议时间为每日9:00~12:00, 13:00~18:00, 其中包含答疑时间。

报到时间为3月21日10:00~21:00, 以及3月22日上午8:30~8:50, 报到时将提供讲义、礼品、邀请函和发票。

会议地点与住宿

本次会议的地点为北京市丰台区冠京饭店。

冠京饭店可以提供住宿服务, 需要预定者请在报名时在邮件中明确说明并填写报名表中附带的宾馆预订表, 我们将会事先通知冠京饭店, 在入住时可以享受优惠价, 即标准间每间310元且附带早餐。通过会务组统一预定住宿的房费代收账户为

支付宝账号: 18310608038 微信账号: Chrischen1128

收款人皆为 陈沁雪

会议费用

- 学生: 1750 元
- 教师: 2000 元
- 企业人员: 2300 元

注: 对于无处报销、纯靠自费参与者, 为减轻经济压力, 费用可优惠 250 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, 食宿和交通需要自理。费用仅支持汇款方式支付, 不支持刷卡和现金支付。

以学生价报名者在报到时请务必携带学生证。会议费可以提供发票和盖有公章的邀请函, 若需要请在报名表中注明, 将在报道时一起提供。

若付款后因故无法参加, 3月13日及之前联系我们可以退还 2/3 的费用, 3月13日后将不予以退款。

汇款账号:

开户银行: 招商银行股份有限公司北京青年路支行

开户名称: 北京科音自然科学研究中心

账号: 110912034210201



报名方式

报名开始时间: 2018年2月22日。人数有限, 报满即止。

欲参加本次会议者请于 <http://www.keinsci.com/workshop/4KBQC/regform.doc> 下载报名表, 填写完整后发送至 keinsci@sina.com。邮件标题统一为“姓名+第四届基础量化会报名”。我们收到报名表后将把汇款方式和相关细节回复至报名者的邮箱中。



北京科音自然科学研究中心
2018年2月22日