

第四届量子化学波函数分析与 Multiwfn 程序研讨会邀请函

_____同学/老师，

为了使广大量子化学工作者能够深入、全面了解重要的量子化学波函数分析方法的原理，掌握功能强大的 Multiwfn 程序的使用，从而显著提升研究水准、做出更优秀的成果，北京科音自然科学研究中心 (www.keinsci.com) 将连同北京科韵科技发展中心于 2018 年 11 月 21 日至 25 日于北京开办“第四届量子化学波函数分析与 Multiwfn 程序研讨会”，详情如下。

主讲人

卢天 博士

卢天博士是 Multiwfn 程序开发者，现任北京自然科学研究中心主任，在量子化学、分子模拟，特别是波函数分析领域有长期深入的研究。发表 SCI 论文 40 余篇，被引用 4000 余次。

会议内容

- 波函数分析的预备知识
 - Multiwfn 的使用基础
 - NBO 方法的原理与 NBO 程序使用基础
 - 轨道成分分析
 - 分子体系态密度(DOS)的绘制与分析
 - 布居分析与原子电荷
 - 键级分析
 - 轨道定域化与 AdNDP 分析
 - 电荷分解分析(CDA)
 - 波函数分析中的实空间函数
 - 计算特定点的属性以及绘制一维、二维、三维图像
 - 拓扑分析
 - 盆分析
 - 定量分子表面分析
 - 弱相互作用分析
 - 芳香性分析
 - 电子激发分析
 - 反应活性与反应位点的预测
 - 其它（能量分解、通过柔性键力常数、修改 Multiwfn 的代码、批处理与制作动画等）
- 此次会议所用幻灯片将以纸质方式打印装订作为讲义提供给每位与会者。

会议时间

2018 年 11 月 21 日至 25 日共五天。会议时间为每日 9:00~12:00、13:00~18:00。

报到时间为 11 月 20 日 10:00~21:00，以及 11 月 21 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。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: 1700 元
- 教师: 1900 元
- 企业人员: 2200 元

费用包含全5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,11月11日及之前联系我们可以退还2/3的费用,11月11日之后将不予以退还,但可以邮寄发票和会议资料。

汇款信息:

开户行: 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	开户行: 上海浦东发展银行北京东三环支行 开户名称: 北京科韵科技发展中心 账号: 91150078801300000330
---	--

报名方式

报名开始时间: 2018年10月20日。

欲参加本次会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/4WFN/regform.doc>,填写完整后发送至 keinsci@sina.com。邮件标题统一为“姓名+第四届波函数分析报名”。



北京科音自然科学研究中心



北京科韵科技发展中心

2018年10月20日