

第五届北京科音基础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 (www.keinsci.com) 连同北京科韵科技发展中心将于 2018 年 7 月 10 日至 15 日于北京开办“第五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

卢天现任北京自然科学研究中心主任, 发表 SCI 论文 40 余篇, 被引用 3500 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。

陈沁雪现任北京科韵科技发展中心主任, 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
- 单点能的计算与相关问题
- 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、ROA 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
- 磁相关性质计算
- 激发态与电子光谱: 理论&计算
- 极化率与超极化率的概念和计算
- 赝势与相对论量子化学初步
- 周期性计算简介
- 分子力学、QM/MM 和 ONIOM 方法的原理与计算
- MOPAC 使用简介
- 计算化学相关书籍简介
- 量子化学程序盘点

会议时间

2018年7月10日至15日共六天。会议时间为每日9:00~12:00, 13:00~18:00。

报到时间为7月9日10:00~21:00, 以及7月10日上午8:30~8:50, 报到时将提供会议资料、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: 1900元
- 教师: 2200元
- 企业人员: 2400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, 7月1日及之前联系我们可以退还2/3的费用, 7月1日之后将不予以退还, 但可以邮寄发票和培训资料。

汇款信息:

开户银行: 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6月10日。

欲参加本次会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/5KBQC/regform.doc>, 填写完整后发送至 keinsci@sina.com。邮件标题统一为“姓名+第五届基础量化研讨会报名”。

北京科音自然科学研究中心

北京科韵科技发展中心

2018年6月10日