

# 第六届北京科音初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 ([www.keinsci.com](http://www.keinsci.com)) 连同北京科韵科技发展中心将于 2018 年 9 月 22 日至 25 日于北京开办“第六届北京科音初级量子化学研讨会”，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，被引用近 4000 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

- 计算化学概述
- 计算化学工作者的常识
- 量子化学理论知识简介
- 基组
- 主流量子化学程序的使用基础
- 分子可视化程序的使用与分子结构的构建
- 单点能
- 势能面
- 几何优化
- 过渡态搜索
- IRC 的计算
- 反应速率的计算
- 振动分析与红外、拉曼、VCD 光谱
- 势能面扫描
- 热力学量与能量相关性质的计算
- 溶剂模型
- NMR 的计算
- 激发态与电子光谱：理论&计算
- 计算化学相关书籍简介

## 会议时间

2018 年 9 月 22 日至 25 日共四天。会议时间为每日 9:00~12:00, 13:00~18:00

报到时间为 9 月 21 日 19:00~21:00, 以及 9 月 22 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

本次会议的地点为北京市丰台区冠京饭店二层会议室。

## 会议费用

- 学生：1650 元
- 教师：1850 元
- 企业人员：2200 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 7 日及之前联系我们可以退还 2/3 的费用，9 月 7 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 7 月 24 日。

欲参加本次会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/6KEQC/regform.doc>，填写完整后发送至 [keinsci@sina.com](mailto:keinsci@sina.com)。邮件标题统一为“姓名+第六届初级量化研讨会报名”。



2018 年 7 月 24 日