

# 第七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](http://www.keinsci.com)) 连同北京科韵科技发展中心将于 2020 年 8 月 2 日至 7 日于北京开办“第七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，在量子化学与分子模拟领域有长期深入的研究，是国际知名的 Multiwfn 波函数分析程序的开发者。发表 SCI 论文 60 余篇，被引用超过 8000 次。担任 30 余种知名理论、计算化学类期刊审稿人。

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
- 量子化学程序盘点

## 会议时间

2020年8月2日至7日共六天。会议时间为每日9:00~12:00, 13:00~18:00。

报到时间为8月1日19:30~21:00, 以及8月2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。我们不统一安排住宿, 会议地点附近有8家以上的旅馆, 参加者请自行预定住宿。

## 会议费用

- 学生: 2400元
- 教师: 2700元
- 企业人员: 3000元

费用包含全6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27日及之前联系我们可以退还2/3的费用, 7月27日之后将不予以退还, 但可以邮寄发票和培训资料。

## 报名方式

报名开始时间: 2020年7月20日。

参加本次会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/7KBQC/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+第七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

2020年7月20日