

## 第 9 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](http://www.keinsci.com)) 将连同北京科韵科技发展中心于 2024 年 12 月 18 日至 22 日于北京开办“第 9 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

卢天是 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 100 余篇，被引用 46000 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)、COHP、光电子谱和模拟扫描隧道显微镜 (STM) 图像
- 布居分析与原子电荷
- 键级分析
- ETS-NOCV 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、理论研究文章的模板等)

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

2024 年 12 月 18 日至 22 日共五天。会议时间为每日 9:00~12:00、13:00~18:00。

报到时间为 12 月 17 日 20:00~20:30, 以及 12 月 18 日上午 8:00~8:30, 报到时将提供会议资料、邀请函和发票。

## 会议费用

- 学生: 2300 元
- 教师: 2500 元
- 企业人员: 2800 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, 12 月 12 日及之前联系我们可以退还 2/3 的费用, 12 月 12 日之后将不予以退还, 但可以邮寄发票和会议资料。

## 参会方式备注

因个人原因不便到现场参会者, 通过寄送会议全部资料的形式参与。

## 报名方式

报名开始时间: 2024 年 11 月 27 日。

欲参加本会议者请下载报名表 <http://www.keinsci.com/workshop/9WFN/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 9 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

2024 年 11 月 27 日