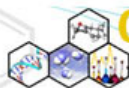




化学学院



College of
Chemistry

理论与计算化学 2010 北京研讨会

暨 Q-Chem 程序使用研习班

邀请函

为加强国际交流，提升国内理论与计算化学水准，北京师范大学‘理论与计算光化学教育部重点实验室’定于 2010 年 5 月 15-17 日在北京举办“理论与计算化学 2010 北京研讨会”，并特邀国际著名量子化学家、美国加州大学 Berkeley 分校的 Martin P. Head-Gordon 教授，及国内理论与计算化学领域著名专家学者，就理论与计算化学的热点和前沿课题，及在诸多领域的应用，进行深入讲解交流讨论。

Head-Gordon 教授还任美国著名计算化学软件公司 Q-Chem 的科学顾问。Q-Chem 公司的主打软件 Q-Chem 由于其优异的计算性能，在有关理论和应用领域享有卓著的国际声誉，在中国也有愈来愈多的用户。为使国内的用户和研究工作者能更全面深入了解 Q-Chem 的功能，熟练掌握 Q-Chem 的计算技巧，及与计算相关的理论问题，我们和美国 Q-Chem 公司，携手中科院超算中心，北京宏剑公司联合举办 Q-Chem 程序使用研习班。Head-Gordon 教授将在班上对 Q-Chem 程序中一些优异的算法和应用进行深入讲解。且 Q-Chem 加入诸多新功能的 v4.0 推出在即，Head-Gordon 教授还将在此主持 Q-Chem 4.0 在全球的首家‘Pre-Release’。该培训班将安排一天半的上机实习，参加者亲自操作计算，专家现场辅导讲解，运行



Q-Chem 程序和与 Q-Chem 程序配套的图形输入输出界面软件 Simu-Q。

诚邀各位踊跃参加，并烦请将此函向有关人员广为散发！

北京师范大学理论及计算光化学教育部重点实验室

方维海、于建国

将在研讨会上做大会报告的中国学者（以姓氏拼音排序）：

- 黎书华教授（南京大学）
- 梁万珍教授（中国科技大学）
- 刘文剑教授（北京大学）
- 帅志刚教授（清华大学）
- 徐 昕教授（复旦大学）

1. 研习班日期：2010年5月15-17日(报名截止日期:5月1日)

2. 地点：北京师范大学化学学院

收费标准：

1) 学术研讨(15日)：¥400.00（包午餐）（缴费参加Q-Chem研习班学员免此费）

2) Q-Chem 研习培训(16-17日)：听课、资料及软件上机操作 教师¥1400/人，学生¥1000/人（包午晚餐，安排住宿但费用自理）

（机房限位，Q-Chem 研习培训仅招收报名前40人；机位名额以缴费顺序

为准。报名者可得到Q-Chem 3.2六个月的免费使用权，及购买Simu-Q的一次性价格优惠）。

3. 联系人：关维晔

电话：010 5880-9437

Email: weiyeg@bnu.edu.cn

4. 收费方式—电汇

户 名：北京宏剑科讯软件技术有限公司

开户行：北京农村商业银行中关村支行

账 号：0413 00010 30000 67691

汇款时请您在附言中注明 姓名、学校信息，并把您的汇款存单传真至010-82610358，以便核对，谢谢！



附录1. Q-Chem的主要功能

1. 基态自洽场方法
 - Hartree-Fock
 - DFT
 - 线性标度方法
2. 电子相关计算方法
 - MP微扰方法
 - 局域MP2方法
 - 多参考态方法
 - 耦合簇方法 (CC)

QCISD、QCISD (T)、QCISD (2)

 - 优化轨道耦合簇方法
3. 激发态方法
 - CIS方法
 - TDDFT
4. 性质分析
 - 耦合簇激发态方法
 - 平衡几何构型和过渡态的自动优化
 - 振动光谱分析
 - NMR屏蔽张量计算
 - 自然键轨道分析
 - 分子中的原子分析
 - 各种溶剂模型(sm8, cosmo)
 - 相关能校正
 - 分子间相互作用分析
5. QM/MM计算
 - 同CHARMM程序连接
 - ONIUM



附录2. Q-Chem的特色

1. 超快速DFT计算（为一般DFT计算速度的3倍）
2. 超快速MP2计算（为一般MP2计算速度的3-10倍，达到了HF的计算速度）
3. 第一个线性标度的NMR化学位移计算
4. 适于自由基和激发态计算的新的DFT和post-HF计算方法
5. 输入简便的QM/MM杂化方法计算
6. 新一代连续溶剂化计算模型 (sm8, cosmo)



2010年北京研讨会及Q-Chem 3.2研习班报名表

| | | |
|--|-------|---|
| 姓名 | 性别 | <input type="checkbox"/> 男 <input type="checkbox"/> 女 |
| 电话 | 电子邮件 | |
| 单位 | 职称 | <input type="checkbox"/> 高级 <input type="checkbox"/> 中级 <input type="checkbox"/> 初级 <input type="checkbox"/> 研究生 |
| 仅参加学术研讨 <input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否 Q-Chem 培训 <input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否 自备电脑 <input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否 | 操作系统 | <input type="checkbox"/> Windows <input type="checkbox"/> Linux |
| Q-Chem 现用户 <input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否 | 需安排住宿 | <input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否 |