

Program

6月16日全天, 报到注册

北师大兰蕙公寓大厅（北师大小西门内）

6月17日上午, 北师大化学楼二楼会议室

8:30 – 9:30 主席：于建国教授（北京师范大学）

- 研习班开幕，北师大化学学院院长方维海教授致欢迎词，介绍“理论与计算光化学教育部重点实验室”。
- Q-Chem 公司 CEO 孔静博士致欢迎词，介绍 Q-Chem 公司。
- 中科院计算机网络信息中心金钟博士致词并介绍中心情况
- 北京宏剑公司 CEO 高宏先生致词并介绍宏剑公司

9:30 – 10:10 照相、休息

10:10 – 11:50 主席：雷鸣教授（北京化工大学）

- 孔 静：Q-Chem: Overview

Linear-scaling density-functional theory

Fast MP2 methods

- 于建国：Why Q-Chem?

12:00 – 14:00 午餐（兰蕙餐厅）

6月17日下午, 北师大化学楼 506 计算机室

- 14: 00 – 15: 00 于建国：How to run Q-Chem
and how to use GUI for Q-Chem
- 15: 00 – 17: 50 上机实践（Linux 用户将在化学楼 715）

18:00 – 晚餐（兰蕙餐厅）

6月18日上午，北师大化学楼二楼会议室

8:30 – 10:00 主席：张雷教授（西南石油大学）

- 孔 静：High-level correlation methods
QM/MM hybrid methods
Solvation models
Noval methods for excited states

- 方德彩教授：溶剂化计算中的一些问题

10:00 – 10:20 休息

10:20 – 11:50 北师大化学楼 506 计算机室

- 于建国：Simu-Q, a GUI customized for Q-Chem

12:00 – 14:00 午餐（兰蕙餐厅）

6月18日下午，

14:00 – 17:50 上机实践和答疑。北师大化学楼 506 计算机室

6月19日上午，北师大化学楼二楼会议室

8:30 – 10:00 主席：盧秀鳳博士（台湾中央研究院化学研究所）

- 孔 静：New DFT algorithms
DFT nondynamical correlations
DFT dispersion correlations

- 方德彩教授：量化计算中的 Linux 操作系统和一些技巧

10:00 – 10:20 休息

10:20 – 11:50 北师大化学楼 506 计算机室

- 于建国: Sophisticated functions of Simu-Q
- 上机实践和答疑。

12:00 – 14:00 午餐 (兰蕙餐厅)

6 月 19 日下午

14:00 – 17:50 上机实践和答疑。北师大化学楼 506 计算机室
(自由参加)

18:00 – 晚餐 (兰蕙餐厅)

Workshop 工作人员

姓名	职责	联系方式
于建国	workshop 组织协调	13241820084
鲍建樟	界面程序整体开发	13311217253
刘凤来	Linux 系统操作和 Q-Chem 运行	13811078776
彭 亮	Windows 系统操作和 Q-Chem 运行	13811995040
宋梦馨	界面程序 Windows 版 开发	13522032596
夏怀英	界面程序 Windows 版 开发	13488725548
王 鸿	workshop 会务	