

Workshop: Ab Initio Theory from Molecules to Materials

学术会议通知

会议简介

为促进电子结构理论领域的学术交流与人才培养，北京大学化学与分子工程学院理论与计算化学研究所将于 **2025 年 7 月 29 日-31 日** 举办“从分子到材料的第一性原理理论(**Ab Initio Theory: From Molecules to Materials**)”讲习班。本次讲习班聚焦密度泛函理论与波函数理论的基本理论以及应用，旨在为本校以及兄弟院校**研究生、高年级本科生**以及相关领域的研究人员提供学习与交流的平台。会议将邀请该领域全球知名专家进行专题报告，涵盖理论发展、算法创新以及材料计算应用等前沿方向。

会议主题与议程

研讨会围绕以下主题展开：

- 密度泛函理论方法
- 波函数理论方法
- 从头计算在分子与材料科学中的应用

会议设置：

- 约 **20 场**特邀报告（40 分钟/场）
- 约 **10 场**投稿报告（20 分钟/场）
- 不超过 **50 个**墙报展示
- 专题讨论与交流环节

注册信息

参会身份	5 月 1 日前	6 月 10 日前	6 月 10 日后
学生	1500 元	1800 元	2100 元
教师	2000 元	2400 元	2800 元

注:

1. 邀请报告人免收注册费。
2. 注册费包含会议材料与餐饮，交通住宿自理。
3. 注册费由北京大学化学与分子工程学院代收，支付方式详见官网。
4. 投稿报告与墙报需通过官网提交摘要，截止日期为 2025 年 6 月 15 日。
5. 本次讲习班规模约 100 人，位置有限，先到先得。会务组预留了少量学校的酒店房间，如需会务组代为预订，请尽早注册并进行说明。

其他信息

- 会议官网: [Workshop: Ab Initio Theory from Molecules to Materials \(29-2025 年 7 月 31 日\): Overview · 北京大学国际会议管理系统 \(Indico\)](#)
- 赞助合作: 欢迎相关期刊以及企业提供赞助，详情请联系会务组邮箱: islidan@pku.edu.cn

“Ab Initio Theory: From Molecules to Materials”组委会
北京大学化学与分子工程学院理论与计算化学研究所
2025 年 3 月 20 日