**量子化学计算项目信息登记表**

|  |  |
| --- | --- |
| **\*客户信息** | |
| 单位名称： | |
| 单位地址: | |
| 联系人姓名： | |
| 联系人电话： | |
| 联系人邮箱： | |
| **\*分子性质计算** | |
| \*项目需求描述 |  |
| \*分子结构信息 |  |
| \*项目类型 | 静电势分析 分子轨道分析 光谱计算  势能面扫描 热力学性质计算 构象分析  分子芳香性分析 分子离域性分析 二面角旋转扫描  其它\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_ |
| \*有无指定计算软件 | 无 有\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_ |
| \*特殊需求 | 无 有\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| **\*分子与分子相互作用计算** | |
| \*分子结构信息  （一对一） | A分子结构信息：\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  B分子结构信息：\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| \*分子结构信息  （一对多） | 单个分子结构信息：\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  多个分子结构信息：\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| \*特殊需求 | 无 有\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| **\*有机反应机理计算** | |
| \*整体需求描述 |  |
| \*实验现象与结果 |  |
| \*详细的合成路线 |  |
| \*猜想的反应机理 |  |
| \*特殊需求 | 无 有\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| **\*项目需求** | |
| \*项目预期结果 | 否 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| \*有无参考文献 | 否 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |
| \*项目周期要求 |  |
| **其他需求补充** | |
|  | |

注：

1. 拟做项目请勾选“×”；
2. 客户如有相关的项目资料请提供；
3. 客户如有其他项目需求，请直接补充。