**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。