



首页 机构概况 科研成果 人才队伍 科技产业 院地合作 国际交流 研究生教育 党群文化 信息公开 机构设置

今天是：2018年11月23日 星期五

请输入关键字



新闻动态

当前位置：首页 > 新闻动态 > 学术活动

- 头条新闻
- 综合新闻
- 学术活动
- 科研动态

广州能源所参加2015理论与高性能计算化学国际会议

发表日期：2015-10-10 编辑：中国科学院广州能源研究所

打印 大 中 小 【关闭】

9月26日至29日，中科院广州能源研究所、中科院天然气水合物重点实验室副研究员颜克凤、阮徐可和研究助理蔡晶参加了由中科院网络中心超级计算中心（SCCAS）主办、中科院青岛生物能源与过程研究所协办的“2015理论与高性能计算化学国际会议”（International Conference on Theoretical and High Performance Computational Chemistry 2015, ICT-HPCC15）。本次会议由比利时鲁汶大学教授Jeremy Harvey担任执行主席，包括来自德、比、印、西、日、中国台湾等共计十二个国家和地区的近五十家科研院所、大学的著名计算化学科学家和学者约一百人出席。本届会议主题包括分子、团簇、固体的电子结构和谱学计算、量子化学理论和高性能计算方法、分子激发态和光化学反应机理理论研究、量子化学和分子模拟在材料、生物大分子和能源领域的应用。

广州能源研究所颜克凤、研究助理阮徐可和蔡晶等科研人员从事天然气水合物生成与分解微观机理研究，并采用分子动力学（MD）和量子化学（QM）等技术进行了水合物微观结构和性质的研究。通过此次会议与参会人员进行了模拟经验交流，为水合物的形成和分解微观机理研究奠定了基础。

ICT-HPCC系列会议创办于2005年，由中科院超级计算中心主办，到今年已是第九届。会议为中外计算化学科学家搭建了新型、高效的学术交流平台，进一步提升了中科院超级计算中心的国际影响力和学术水平，提供了更多的合作契机。会议得到了中科院国际合作局、网络中心、北京并行科技有限公司和浪潮公司的大力支持，对促进国内外高性能计算化学领域的学术交流与合作具有重要意义，已发展成为独具特色的品牌国际会议。经过十年的发展，它的影响力也与日俱增，业内具有广泛影响力的SC期刊、美国化学会主办的 *Journal of Physical Chemistry A* 于2014年10月出版了会议专刊 <http://pubs.acs.org/toc/jpcafh/118/39>。



版权所有 © 中国科学院广州能源研究所 Copyright © 2002-2013 粤ICP备11089167号

地址：广州市天河区五山能源路2号 电话：020-87057639（党政办） 87057637（科技处）

E-mail:web@ms.giec.ac.cn

