



## 2012年计算化学理论与应用国际会议在意大利召开

文章来源: 计算机网络信息中心

发布时间: 2012-09-11

【字号: 小 中 大】

当地时间9月2日至7日, 2012年计算化学理论与应用国际会议(Theory and Applications of Computational Chemistry, 简称TACC2012)在意大利帕维亚(Pavia)举行。受大会主席、著名计算化学家Enrico Clementi教授之邀, 中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心计算化学与国际合作事务主管金钟副研究员参加了TACC2012会议并做口头邀请报告。本次会议共有来自全世界各地三十多个国家的计算化学科学家、青年科研工作者逾三百人出席。

会议由大会报告、口头邀请报告和K Computer Day分会组成, 共有纳米器件、反应动力学、化学中的相对论问题、计算生物化学的方法发展及应用、聚合物、生物体系催化、精确电子结构理论、化学信息学、催化理论、量子力学应用、周期及半周期性体系、医学纳米技术、计算生物化学中的改进分子模拟取样方法、量子力学模拟、量子化学中的计算方法等分会和议题。金钟副研究员受邀做了题为*Applications and Co-Design of post-petascale supercomputers in China* 和*High Performance Computing Applications in Chinese Academy of Sciences* 的两个邀请报告, 分别介绍了中国高性能计算化学科研人员如何利用超级计算机为计算化学科研服务和超级计算中心在高性能计算应用上取得的丰硕成果。会议期间还举办了K Computer Day分会, 对高性能计算化学给予了重点关注。由来自美国、中国、欧盟、日本等国家和地区的高性能计算科研工作者与计算化学科学家一起探讨如何利用现代超级计算机的强大性能促进计算化学科研工作。

通过参加该会议, 使计算化学国际学术界更好地了解了超级计算中心, 扩大了影响, 并与一些国际知名计算化学专家和学术研究机构在程序开发和算法方面建立起了更广泛的交流与合作。

TACC2012会议是由国际交叉学科科学家联合会(Internet Association of Scientists in the Interdisciplinary Area, AISIA)发起, 由意大利帕维亚大学承办的第三届计算与理论化学应用领域的综合性国际会议, 受到了从事理论计算研究者的广泛关注。该系列会议分别于韩国召开了第一届(2004)和中国上海召开了第二届(2008)会议, 每届会议均吸引了世界各地的数百名国际知名的计算化学科学家参与, 是领域内规格较高、规模较大的知名国际会议。

[打印本页](#)[关闭本页](#)