

“2013理论与高性能计算化学国际会议”在大连举行

文章来源：计算机网络信息中心

发布时间：2013-07-24

【字号：小 中 大】

7月21日至24日，由中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心（SCCAS）计算化学虚拟实验室（VLCC）主办、中国科学院大连化学物理研究所协办的“2013理论与高性能计算化学国际会议”（International Conference on Theoretical and High Performance Computational Chemistry 2013, ICT-HPCC13）于辽宁省大连市召开。本次会议由国际量子分子科学院院士、著名学术杂志Chemical Physics主编、国际著名计算化学家——德国慕尼黑工业大学化学系Wolfgang Domcke教授担任大会主席，包括挪威奥斯陆大学Trygve Helgaker教授（国际量子分子科学院院士）、德国马普煤炭研究所所长Walter Thiel教授（国际量子分子科学院院士）和中科院大连化物所何国钟院士、清华大学帅志刚教授（国际量子分子科学院院士和欧洲科学院外籍院士）、计算化学虚拟实验室主任——中科院大连化物所韩克利研究员、中国科学技术大学杨金龙教授、北京大学刘文剑教授、复旦大学徐昕教授等多名“杰出青年”获得者和长江学者在内的、来自德、挪、匈、法、荷、希、英、美、日和韩等共十二个国家的近五十家科研机构、大学和独立研究所的著名计算化学科学家、专家和学者近一百二十人出席了会议。会议主题有分子、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、量子化学和分子模拟在生物、环境和能源等领域应用、材料结构与性能等。

韩克利主持了开幕式。Wolfgang Domcke教授向与会者表示欢迎并回顾和展望了高性能计算化学的现状与未来。中科院计算机网络信息中心副主任迟学斌代表主办方致辞，对大会的召开表示热烈祝贺并预祝会议圆满成功。中科院大连化物所副所长刘中民对来宾表示了热烈的欢迎。计算化学虚拟实验室执行负责人金钟副研究员向广大与会人员介绍了ICT-HPCC会议及ICT-HPCC13的主题。刘文剑教授主持了首个时段的学术报告。Walter Thiel教授做了题为*Theoretical Studies of Enzymatic Reactions*的开场学术报告，介绍了在生物催化机理研究方面的工作，包括过渡金属化合物的催化反应、激发态动力学和酶促反应的振转光谱等研究的进展。在历时三天的会议中，报告人向广大与会者宣讲了最新的研究成果，与会者积极提问和参与讨论、报告人认真回答，形成了热烈而活跃的学术互动氛围。会议还组织了墙报展示，国际知名计算化学家组成的评委会对墙报的学术成果进行了评选。大连化物所陈俊生同学获Excellent Poster一等奖，来自复旦大学、中科院化学所、清华大学和大连化物所的五位同学分获二、三等奖。北京大学张亚超同学获得了由全体参会者投票的Best-Designed Poster评选第一名，来自大连化物所、厦门大学 and 北京大学的3位同学分享了Best Design评选的其他奖项。在晚宴上举办了简短发奖仪式，为优胜者颁发了会议主席亲笔签名的证书和奖金。ICT-HPCC13在轻松、友好、活泼的气氛中落下帷幕。

ICT-HPCC系列会议创办于2005年，由计算化学虚拟实验室举办，到今年已是第七届。活跃和浓郁的学术气氛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计算化学虚拟实验室的国际影响力和学术水平，提供了更多的合作契机。ICT-HPCC13会议得到了中科院国际合作局、国家自然科学基金委、中科院计算机网络信息中心、浪潮公司和北京北龙超级云计算公司的大力支持，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，为中科院超级计算中心计算化学虚拟实验室的发展展开了新的一页。