

2017 年理论与高性能计算化学国际会议通知

（第一轮）

由中国科学院计算科学应用研究中心、中国科学院计算机网络信息中心与浙江大学联合主办的“International Conference on Theoretical and High Performance Computational Chemistry 2017”（ICT-HPCC17）将于**2017年10月26~29日在杭州**举行。大会将邀请国内外计算及理论化学领域的知名学者讨论相关领域的前沿进展，为计算和理论化学领域的科研工作者提供高水平的交流平台。本次大会由 Journal of Physical Chemistry A/B/C 和 Journal of Physical Chemistry Letters 杂志资深编辑，意大利比萨大学 BENEDETTA MENNUCCI 教授担任主席。已有多位国内外顶尖学者接受大会邀请作为嘉宾出席，详情见后。我们诚挚的邀请您加入此次思想的碰撞，与我们相约杭州！

“中国科学院计算科学应用研究中心”（“Center of Scientific Computing Applications & Research, Chinese Academy of Sciences”，简称“COSCAR”）为研究型的非法人研究单元，依托于中国科学院计算机网络信息中心，由中国科学院院属相关研究所共建，具有非营利和相对独立的性质，是高性能计算科学应用软件研发的基础性、跨学科、开放式的综合研究平台。计算化学虚拟实验室（“Virtual Laboratory for Computational Chemistry”，简称“VLCC”）是依托 COSCAR 的新型虚拟科研组织。

本次会议为计算化学虚拟实验室（VLCC）举办的第 11 届计算化学国际会议。自创办以来，已累计吸引了国内外学者超过 1200 人次参加。**Journal of Physical Chemistry A** 杂志曾为 ICT-HPCC 会议出版专刊（JPCA，第 118 卷第 39 期，页 8889-9280，2014，<http://pubs.acs.org/toc/jpcfah/118/39>）。ICT-HPCC 系列会议已逐渐发展成为我国独具特色的计算化学国际学术交流平台。

一、会议日期

2017 年 10 月 26~29 日

二、 会议地点

杭州（具体地点另行通知）

三、 会议主题：

此次会议主题为理论与计算化学领域前沿进展及高性能计算在各领域的应用 (Advances in theoretical and computational chemistry and the application of high performance computing in related area)。其中包括：

1. 复杂系统的多尺度模拟 (Multi-scale modeling and simulation of complex systems)
2. 化学、生物及材料体系的结构性质、相互作用与动力学过程 (Structural properties, interactions and dynamics of chemical, biological and material systems)
3. 复杂分子环境中的反应机理及与能量利用相关的化学物理过程 (Chemical reaction in complex molecular environment and chemical physics of energy transfer processes)
4. 计算化学方法学进展 (Methodological advances in computational chemistry)

四、 会议费用（包含会议费、材料费）

会议的正式语言为**英语**，会议注册费标准为：

| 类别 | 注册费 |
|----|--------|
| 学生 | 1500 元 |
| 老师 | 1800 元 |
| 企业 | 2500 元 |

在 9 月 26 日之前注册并缴费可享受 300 元优惠。

五、 报名方式:

登陆会议网站进行注册:

<http://ict-hpcc17.vlcc.cn/index.php/component/users/?view=registration>

报名 Oral 和 Poster, 请提交摘要:

<http://ict-hpcc17.vlcc.cn/index.php/abstract-submission>

会议将举办 Poster 评选并设置最高奖金额达 1000 元的多个奖项, 并将授予优胜者获奖证书。

六、 付款方式

电汇 (推荐): 截止日期 2017 年 9 月 26 日 (含)

注册时凭汇款单领取发票(**发票项目: 会议费**), 在汇款时备注**“ICT-HPCC17 会议费”**并发送回执单给我们以方便查账。

收款单位全称: 中国科学院计算机网络信息中心

开户行名称: 中国工商银行海淀支行营业部

账号: 0200 0496 0920 0016 431

现场付款: 签到当天可以直接用现金付款, 注册费无优惠

七、 联系方式

登陆会议官网了解最新消息: <http://ict-hpcc17.vlcc.cn/>

秘书长: 金钟研究员 (zjin@sccas.cn)、侯廷军教授 (tingjunhou@zju.edu.cn)

联系人: 张宝花 (ict-hpcc@sccas.cn, 010-58812131)

黄荷 (ict-hpcc@sccas.cn, 010-58812172)

期待着您的光临!

中国科学院计算科学应用研究中心

2017 年 7 月

附已确认邀请报告人名单:

- [Benedetta Mennucci](#) (University of Pisa, Italy) (Chair)
- [Michele Cascella](#) (University of Oslo, Norway)
- [Christophe Chipot](#) (University of Lorraine, University of Illinois at Urbana-Champaign)
- [Marco De Vivo](#) (Italian Institute of Technology, Italy)
- [Carmen Domene](#) (King's College London, UK)
- [Odile Eisenstein](#) (Université Montpellier 2, France)
- [Yi Qin Gao](#) (Peking University)
- [Ke-Li Han](#) (Dalian Institute of Chemical Physics, CAS, China)
- [Tingjun Hou](#) (Zhejiang University, China)
- [Niu Huang](#) (National Institute of Biological Sciences, Beijing, China)
- [Ulrich Kleinekathöfer](#) (Jacobs University Bremen gGmbH, Germany)
- [Damien Laage](#) (Ecole Normale Supérieure, France)
- [Zhenggang Lan](#) (Qingdao Institute of Bioenergy and Bioprocess Technology, CAS)
- [Xiaoxia Li](#) (Institute of Process Engineering, CAS)
- [Youyong Li](#) (SooChow University)
- [Filippo Lipparini](#) (University of Pisa, Italy)
- [Haiguang Liu](#) (Beijing Computational Science Research Center, China)
- [Haiyan Liu](#) (University of Science and Technology of China, China)
- [Wenjian Liu](#) (Beijing University, China)
- [Zhong-Yuan Lu](#) (Jilin University, China)
- [Yanting Wang](#) (Institute of Theoretical Physics, CAS)

- [Dongqing Wei](#) (Shanghai Jiao Tong University, China)
- [John Zenghui Zhang](#) (NYU Shanghai/East China Normal University, China)
- [Xin Zhou](#) (University of Chinese Academy of Sciences)