



## 第八届国际分子模拟与信息技术应用学术会议

尊敬的\_\_\_\_\_先生/女士，您好！

第八届国际分子模拟与信息技术应用学术会议将于2016年09月在大连召开。

### 会议通知

#### 会议背景:

“分子模拟与信息技术应用学术会议”是在上世纪八十年代中期开始的“全国分子力学与分子设计学术会议”和创腾科技用户大会的基础上形成的。自2000年至今已经成功的举办了七届。2014年在苏州举办的上一届会议，规模超过了300人，吸引了国内外众多专家学者的参与，已经被公认为该领域内一个高水平的国际学术会议。本届会议将继续秉承大会精神，举办成为高标准、综合性、国际性的大会。现将第八届会议的相关内容和议题通报如下，欢迎相关领域的国内外专家学者积极投稿和参加本届会议。

#### 会议宗旨:

旨在为我国从事分子模拟与信息技术应用的企业、高校、科研机构的专家、学者提供相互交流与合作平台，探讨分子模拟及信息技术在化学、材料和生命科学等领域中的应用与发展，以及交流如何更好的应用信息技术来带动决策、管理和研发模式的变革与创新。

#### 会议主题:

分子模拟与信息智能技术已广泛应用于化学、材料及生命科学领域的创新研究。国内外涉及医药、生物技术、农药与精细化工、航空航天、石油化工和电子材料等行业的主要研究机构、大学、跨国企业和部分国内企业都在利用这些技术在新药发现、基因的进化与功能、新型航天船舶及汽车材料、纳米科技、高效催化剂和新型功能材料等领域进行创新研究与开发工作。目前，分子模拟及相关的信息智能技术已经成为实验科学家和信息与计算专家共同使用的平台级技术，世界范围内的研究学者都在努力促进计算技术、信息（数字化）技术、实验技术三者的有机结合，并将其融合在一起应用于材料和生命等研究领域，加速新材料的研发速度（材料基因组计划），加速新药研发。如何合理地利用海量的实验及模拟数据，是大数据时代学者们面临的一个新的挑战。同时，如何建立并有效地共享预测模型，也是共享经济时代摆在我们面前的一个新的课题。本届会议将在分子模拟与信息智能技术应用于大数据时代的科研创新以及如何建立基于模型的新型研发模式等方面进行深入的探讨和广泛的交流。

#### 分会设置:

- 【材料科学分会A】：分子模拟技术在化学化工领域的应用
- 【材料科学分会B】：分子模拟技术在材料物理领域的应用
- 【生命科学分会A】：药物发现与化学信息学
- 【生命科学分会B】：生物大分子与生物信息学

#### 会议报告形式:

会议语言：中文、英文

报告形式：会议的报告组织采用邀请报告及征稿两种形式，由学术委员会负责确定大会邀请报告、分会邀请报告、口头报告及征稿评审工作，并由组织委员会负责具体执行。

- 1) 大会邀请报告：30分钟（包括5分钟答疑时间）
- 2) 分会邀请报告：20分钟（包括5分钟答疑时间）
- 3) 分会口头报告：15分钟（包括5分钟答疑时间）

#### 会议主办单位：

- 大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室
- 中国科学院上海药物研究所
- 北京创腾科技有限公司

·中国化学会计算(机)化学专业委员会

会议学术委员会（以姓氏拼音为序）

·主任：陈凯先院士

·副主任：沈竞康教授徐筱杰教授蒋华良教授周涵教授

·顾问：

陈冀胜院士陈难先院士段雪院士 郭宗儒教授黄维院士

李正名院士 柳百新院士沈倍奋院士 沈寅初院士王崇愚院士

魏于全院士吴云东院士徐如人院士 张礼和院士张希院士

赵国屏院士 于吉红院士

·常委：

曹泽星教授程卯生教授崔田教授代振宇教授 杜冠华教授

高清志教授 侯廷军教授蒋青教授 黎健博士 李亦学教授

彭述明教授 彭练矛教授 唐亚林教授田永君教授杨光富教授

杨金龙教授 杨锐教授尤启冬教授张红星教授朱维良研究员

## 会议日程

会议议程：

时间	内容	地点
9月24日（星期六）	全天注册报到	泰达美爵酒店大堂
9月25日（星期日）	开幕式、大会报告	泰达美爵酒店大剧院、 分会场
	材料科学分会A、B	
9月26日（星期一）	生命科学分会A、B	泰达美爵酒店分会场
	分子模拟技术答疑会	

## 会议嘉宾

**曹泽星教授**

**厦门大学**

简介：曹泽星，博士，厦门大学教授，博士生导师，兼任World Scientific发行的“Journal of Theoretical and Computational Chemistry”杂志执行编辑（Executive Editor）。1993年6月毕业于四川大学化学系，获理学博士学位。1995年12月进入厦门大学化学博士后流动站，1997年11月出站后留校工作。1999-2001年先后在美国Texas A&M大学和德国波恩大学从事博士后研究。研究兴趣包括：激发态与光化学；理论催化；计算生物学；计算材料学。迄今，已在国内外学术期刊上发表论文210多篇，主持或参加了自然科学基金重大、重点、面上项目等15项、科技部973项目课题4项。2000年获中国高校自然科学一等奖（第四完成人），2002年入选教育部跨世纪人才计划，2015年获福建省自然科学一等奖（第二完成人）。

**崔田教授**

**吉林大学**

简介：1964年出生，教授、博士生导师。现任吉林大学物理学院院长、超硬材料国家重点实验室主任。1992年吉林大学物理系博士毕业后留校。在美国UC Berkeley完成博士后研究，曾赴美国Lawrence Livermore国家实验室做访

问研究。1999年起在日本东京大学物性研究所 (ISSP) 进行了两年高级访问研究。

### 邓伟侨研究员

#### 中国科学院大连化物所

简介：邓伟侨，研究员，博士生导师。1994年毕业于兰州大学化学系获学士学位，1997年中国科学院大连化学物理研究所获硕士学位，2004年美国加州理工学院获博士学位。毕业后曾任美国加州理工学院副研究员、新加坡南洋理工大学助理教授。2009年8月加入大连化物所，入选中科院“百人计划”，任大连化物所研究员。研究工作主要以创新理论方法为核心，用计算机模拟设计所需性能材料，并有效地合成所设计的材料

### 杜冠华研究员

#### 中国医学科学院药物研究所

简介：杜冠华，男，博士，研究员，博士生导师，现任中国医学科学院、中国协和医科大学药物研究所副所长，药物筛选中心主任，兼任中国药理学会秘书长，国家863计划主题专家，亚洲西太平洋地区药理学联合会执行委员会委员。

主要从事药物发现的理论和技术研究，特别是在高通量药物筛选、神经药理学和心脑血管药理学领域进行了大量研究工作，主持建立了我国第一个高通量药物筛选体系。近几年来，主持完成863、国家自然科学基金、科技部1035计划、科技部公益重大项目等国家科研项目十余项，研究工作取得良好进展。主持完成的“高通量药物筛选技术体系的研究和应用”成果，经初评为北京市科技进步二等奖和中华医学科技进步三等奖；利用研究的技术体系，开展药物筛选工作，为本单位和国内科研机构进行药物筛选60余万样品次，发现一批具有研究开发价值的活性化合物，有些已经进入深入研究阶段。

### 蒋华良研究员

#### 中国科学院上海生命科学研究院上海药物研究所

简介：蒋华良长期致力药学基础研究和新药研发，他通过生物学、化学和计算科学等多学科的交叉，开展原创药物研究新策略与新方法、先导化合物发现和优化、药物靶标调控机制等研究。他发展了一系列靶标发现和药物设计新方法，被国际同行高度重视和应用，推动我国该领域研究水平进入国际前沿。他发展了能预测化合物药效的理论计算方法，解决了药物设计领域的重大难题。他针对多种重要靶标发现了数十个新结构类型的先导化合物，其中1个抗勃起功能障碍候选药物已进入临床试验，5个抗2型糖尿病等疾病的候选新药正处于临床前研究。迄今他在国际学刊上发表了通讯作者论文200余篇、综述10篇；合编专著16本，译著2本；被他引6000余次。申请专利115项，已授权35项，实现成果转让3项（合同金额达1.8亿）。获国家自然科学基金二等奖、何梁何利科技进步奖等多种奖项。目前担任J. Med. Chem.副主编和其他5种国际学刊的编委。

蒋华良长期担任863计划、973计划和国家基金委重大研究计划专家组成员，具有较强的组织协调和团队管理能力。此外，蒋华良还是一位优秀的战略科学家，曾承担科技部、基金委和中科院多项战略研究任务，相关成果被纳入《国家中长期发展规划》、基金委重大研究计划和中科院创新2020计划，主编专著1本。

### 蒋青教授

#### 吉林大学

简介：蒋青教授，1990年博士毕业于德国斯图加特大学（马普金属所），随后在德国柏林工业大学做2年博士后，1992年被聘为吉林工业大学（2000年并入吉林大学）教授，曾在美国加州大学欧文分校、德国卡尔斯鲁厄核研究中心、日本东北大学做访问教授。现任吉林大学教育部汽车材料重点实验室主任。

蒋青教授是国家基金委杰出青年研究基金获得者，教育部长江学者奖励计划特聘教授，为英国皇家物理学会Fellow，亚太材料科学院Academician。先后承担国家973课题和国家自然科学基金项目多项，从事纳米材料的相变、界面、吸附与催化的热/动力学以及能隙调控热力学研究。获得国家发明专利8件，发表SCI杂志论文400多篇，文章被Web of Science 引用10000多次。H-指数为52。

### 来鲁华教授

#### 北京大学

简介：来鲁华，北京大学化学与分子工程学院长江特聘教授，分子动态与稳态国家重点实验室主任，物理化学研究所所长，定量生物学中心副主任。国家杰出青年基金获得者。担任或曾担任PLoS Computational Biology、BMC Bioinformatics等杂志的副主编或编委。

来鲁华长期从事药物设计方法与应用和蛋白质设计研究。其课题组发展的基于蛋白质靶标结构的全新药物设计程序LigBuilder等多种药物设计技术在国内外得到广泛应用，相关程序国内外注册用户超过5000家，已有多个成功应用实例见诸报道；近年来开展了基于系统生物学的药物设计系统研究，建立了针对疾病相关分子网络状态进行药物干预方案设计的方法，发展了针对多靶标的药物设计方法，系统研究了药物分子结合动力学对于药效的影响，首次利用别构化合物合理设计发现了代谢酶的激活剂；在蛋白质结构和功能设计领域取得了重要进展，发展了适用于不同体系的多种蛋白质相互作用设计方法，并针对重大疾病相关蛋白质靶标成功进行了结合蛋白质设计，为蛋白质药物的研发开拓了新途径。发表研究论文200余篇，申请软件版权20余项。

### 李隽教授

#### 清华大学

简介：李隽，1962年4月生，1992年毕业于中国科学院福建物质结构研究所物理化学专业，师从中国著名结构化学家卢嘉锡教授和量子化学家刘春万研究员，获博士学位。毕业后留所担任助理研究员，并于1993年破格晋升为副研究员。2004年入选清华大学“百人计划”，被聘为化学系教授、博士生导师；2005年受聘为教育部“长江学者”特聘教授，并获国家“杰出青年科学基金”资助。

### 徐筱杰教授

#### 北京大学

简介：徐筱杰，浙江温州人。1960年毕业于北京大学化学系，曾在美国纽约州立大学石溪分校，加州大学戴维斯分校，乔治城大学医学中心从事研究工作。现任北京大学化学与分子工程学院教授，博士生导师，北京大学中药现代研究中心主任，中国化学会计算化学委员会副主任。已发表论文200余篇，他人引用1000余次，出版多本专著，申请多项专利，曾获国家自然科学基金二等奖、三等奖各一项，国家教育部科技进步一等奖、二等奖各一项。目前承担973及国家自然科学基金重大项目。主要研究领域包括：药物设计方法及应用、中医药信息系统、超分子及介观体系的计算机模拟和基于中药资源的新药研制。

### 杨金龙教授

#### 中国科学技术大学

简介：杨金龙，男，1966年1月生于江苏。中国科学技术大学教授，教育部长江学者特聘教授，国家杰出青年科学基金获得者，国家重大科学研究计划项目首席科学家，基金委创新研究群体负责人。1991年获中国科学技术大学理学博士学位。研究领域为理论与计算化学，在国际学术期刊上发表论文400余篇。合作研究成果于1999年和2001年两次被科技部评为中国基础科学研究十大新闻，于2001年、2005年和2013年三次入选两院院士评选的中国十大科技进展新闻，入选教育部评选的2009年度中国高校十大科技进展。曾获得教育部首届高等学校优秀青年教师奖、中国分析测试学会“CAIA”奖特别奖、国家自然科学基金二等奖、第九届中国青年科技奖等奖项。

### 张红星教授

#### 吉林大学

简介：张红星，博士，教授，博士生导师。1991年7月至1993年8月在美国亚历桑那州立大学化学系从事博士后研究；1996年10月至1998年8月在香港大学化学系做访问教授，进行合作研究。现任理论化学计算国家重点实验室主任、《高等学校化学学报》编委。

### 赵纪军教授

#### 大连理工大学

简介：赵纪军，1996年南京大学物理系获凝聚态物理学博士学位，导师王广厚院士。1997至2005年期间，先后在意大利国际理论物理中心、美国北卡大学、美国华盛顿州立大学担任博士后、研究助理教授、研究员。2006年起任大连理工大学教授，2014年起任三束材料改性教育部重点实验室主任；担任Molecular Simulation等四个SCI国际期刊编委。主要研究领域为团簇与低维物理、核聚变堆材料、分子晶体与含能材料。发表SCI论文300多篇，总引用9000多次，H因子48。

### 周涵教授

#### 中国石化石油化工科学研究院

## 会议门票

会议注册费：(包含会议资料、会议用餐、会议纪念品；参会人员住宿费及交通费自理。)

注册类型	注册费	优惠费用及条件 1) 9月1日前报名并交纳注册 2) 同一单位3人以上参加(包括3人)
教师及企业代表	RMB 2000元/人	RMB 1600元/人
学生代表 (报到时需出示学生证)	RMB 1400元/人	RMB 1000元/人

说明：以上优惠只能选择其一，无叠加优惠。

