

第八届国际分子模拟与信息技术应用学术会议

The 8th International Conference on Molecular Simulations and Informatics Technology application

地点：大连泰达美爵美居酒店

时间：2016年9月24日-26日

第二轮通知

尊敬的各位学者，您好！

“第八届国际分子模拟与信息技术应用学术会议”第一轮通知发出后，得到了相关领域众多专家学者的积极响应和热情支持。本届会议由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、中国化学会计算(机)化学专业委员会和北京创腾科技有限公司联合举办，并于2016年9月24日至26日在大连举办。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。

在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、中国化学会计算(机)化学专业委员会和本次会议学术委员会的支持下，会议的各项筹备工作正在按计划顺利进行。我们真诚地邀请您参加本次会议。现将会议筹备情况及第二轮通知寄给您，请您仔细阅读。请您在**9月15日前**登录大会网站在线报名专栏，提交您的参会信息，或填写随附的参会回执并邮寄或发送至会务组。以便我们在会议召开之际，为您安排好相关参会事宜。

会议内容索引：

一、会议议程与分会设置

四、会议论文征集及墙报交流

二、会议邀请报告(7月20日前确认的报告)

五、会议费用、会议报到及报名方式

三、会议学术委员会、组织委员会组成

六、住宿安排、乘车路线及地图

欢迎您对本届会议提出宝贵的意见和建议，关于报名和参会的任何问题，请联络本届会议会务组。

会议联系：

北京创腾科技有限公司

施小姐：021-51821768 转 213；13795207001

陈女士：021-51821768 转 233；13916858963

大连理工大学：

赵纪军：0411-84708748

苏 艳：13940951562

- 报名信箱：huiyi@neotrident.com
- 论文投稿：lunwen@neotrident.com
- 会议网站：<http://icmsi.neotrident.com>

一、会议议程与分会设置

会议时间: 2016 年 9 月 24 日-26 日 (周六至周一)

会议地点: 大连泰达美爵美居酒店 (中山区中南路 205 号)

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
9 月 26 日 (星期一)	材料科学分会 A、B 生命科学分会 A、B 分子模拟技术答疑会	泰达美爵酒店分会场

会议分会设置 :

【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)

二、会议邀请报告名单 (截止 7 月 20 日确认, 按姓名排序, 排名不分先后)

姓名	单位	报告题目
大会邀请报告		
曹泽星教授	厦门大学	催化过程全程模拟与活性调控
崔田教授	吉林大学	TBD
邓伟侨研究员	中国科学院大连化物所	Van der waals force field and its applications in simulating microporous polymers

杜冠华研究员	中国医学科学院药物研究所	TBD
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	TBD
蒋青教授	吉林大学	Design of electrode materials with enhanced electronic and ionic transports
来鲁华教授	北京大学	功能蛋白质设计
李隽教授	清华大学	TBD
徐筱杰教授	北京大学	多尺度网络药理学及其在药物研究中的应用
杨金龙教授	中国科学技术大学	First-principles design of photocatalysts for water splitting
张红星教授	吉林大学	TBD
赵纪军教授	大连理工大学	二维单层材料的晶界与界面的第一性原理研究
周涵教授	中国石化石油化工科学研究院	TBD
材料分会 A 邀请报告：分子模拟技术在化学化工领域的应用		
Chatterjee	BIOVIA	TBD
步宇翔教授	山东大学	有机磁子动态磁性的从头算分子动力学模拟
陈建华教授	广西大学	硫化矿物固液界面结构及氧化的密度泛函理论研究
陈景文教授	大连理工大学	面向化学品风险预测与管理的计算毒理学
陈胜利教授	武汉大学	Electrochemical Formation and Phase Transition of Oxygenated Adsorbates on Pt(111): Combined DFT calculations and Monto Carlo (MC)
代振宇教授	中国石化石油化工科学研究院	分子筛催化材料基因的实验与理论探索
邓久帅教授	昆明理工大学	黄铁矿热分解动力学模拟
都时禹研究员	中国科学院宁波材料所	The electronic structures and thermal, electrical and transport properties of two dimensional transition metal carbide/nitride (MXene)
李晓霞研究员	中国科学院过程所	TBD
马海波副教授	南京大学	Long-range Charge Transfer States in Organic Photovoltaics
舒远杰教授	西安近代化学研究所	含能材料设计与性能评估：分子模拟作用及存在问题
苏艳副教授	大连理工大学	TBD
孙淮教授	上海交通大学	TBD

孙俊良副教授	北京大学	利用三维电子衍射的结构确定
王宝俊教授	太原理工大学	Cu 基催化剂的微观特征和催化性能
苑世领教授	山东大学	纳米孔道内驱油体系的模拟
张海军教授	武汉科技大学	DFT 计算在催化反应及材料合成过程中的应用 (拟定)
张宏玉副教授	中国石油大学(华东)	TBD
张军教授	中国石油大学(华东)	分子模拟技术在石油工程领域的应用基础研究
赵景祥教授	哈尔滨师范大学	基于二维纳米材料的氧还原电催化剂构建及催化性能的理论研究
材料分会 B 邀请报告：分子模拟技术在材料物理领域的应用		
陈松研究员	昆明贵金属研究所	第一性原理方法在贵金属材料科学与工程研究中的应用
郭光军研究员	中国科学院地质与地球物理研究所	天然气水合物成核结晶的分子动力学模拟
韩培德教授	太原理工大学	超级奥氏体不锈钢氧化膜结构及形成机制的研究
何巨龙教授	燕山大学	新型 sp ² 杂化的三维碳结构
江大志教授	国防科学技术大学	交联碳纳米材料及其掺杂聚合物物理性能的分子动力学模拟
李明宪教授	台湾淡江大学	TBD
李亚飞教授	南京师范大学	含有反常规化学键的二维材料设计与模拟
林哲帅研究员	中国科学院理化技术研究所	TBD
刘立钊讲师	大连理工大学	TBD
刘英教授	河北师范大学	From C ₆₀ to volleyballene
王苍龙研究员	中国科学院近代物理研究所	材料辐照效应原子尺度模拟
王晓辉研究员	沈阳金属所	TBD
杨传路教授	鲁东大学	第一性原理计算研究掺杂改进 TiO ₂ 光电性质
杨志华教授	中国科学院新疆理化技术研究所	系列硼酸盐的非线性光学性质探索
张胜利讲师	南京理工大学	Arsenene and antimonene (2D Sb): Theoretical prediction, synthesis, properties
张志勇教授	西北大学	石墨炔及其衍生物光电特性的第一性原理计算
郑广教授	江汉大学	Towards First-principles Understanding the Properties for Materials
朱景川教授	哈尔滨工业大学	TBD
生命分会 A 邀请报告：药物发现与化学信息学		
付伟教授	复旦大学	Drug Design and Signal Transduction Mechanism on aminergic GPCR

付先军教授	山东中医药大学	In silico annotation of Mode-of-actions (MOAs) in the traditional cold, hot and neutral nature of Chinese medicines: bridge the gap
高清志教授	天津大学	TBD
古江勇博士	广州中医药大学	基于生物通路的定量药效评价
侯廷军教授	浙江大学	TBD
胡齐悦博士	恒瑞医药	Discovery of Potent and Orally Bioavailable Inhibitors of Human Uric Acid Transporter 1 (hURAT1)
姜凤超教授	华中科技大学	结合分子对接优化作用于 MyD88 先导化合物的研究
姜曰水教授	曲阜师范大学	新型多肽药物分子的理性设计与活性分析
孔德信教授	华中农业大学	三维生物相关谱在 GPCR 亚型选择性预测中的应用
刘振明教授	北京大学	TBD
罗海彬教授	中山大学	TBD
沈陵陵博士	诺华（中国）生物医学研究有限公司	Informatics in Chemistry idea tracking for drug design
司书毅研究员	中国医学科学院医药生物技术研究所	新型抗代谢及抗感染药物靶标确认与先导物发现研究
唐赟教授	华东理工大学	警示子结构识别及其在药物设计中的应用
王存新教授	北京工业大学	用分子对接方法研究蛋白质-RNA 相互作用
王健副教授	沈阳药科大学	药物设计策略在新药研发中的案例分析
王任小研究员	中国科学院上海有机所	TBD
肖志艳研究员	中国医学科学院药物研究所	虚拟筛选在抗代谢性疾病先导结构发现中的应用初探
于坤干研究员	中国科学院上海药物研究所	TBD
张筱宜讲师	首都医科大学	TBD
生命分会 B 邀请报告：生物大分子与生物信息学		
冯健男研究员	军事科学院基础研究所	TBD
胡黔楠研究员	中国科学院天津工业生物技术研究所	一站式微生物细胞工厂设计技术体系构建
黄京飞研究员	中国科学院昆明动物研究所	疾病个性化诊疗的人体多组织代谢模拟研究
林东强研究员	浙江大学生物工程研究所	Rational design of mixed-mode ligands for antibody purification: molecular simulation approaches

刘冰副教授	天津科技大学	TBD
刘劲松研究员	中国科学院广州生物 医药与健康研究院	Structural Insights into the Aminotransferase CrmG in Caerulomycin Biosynthesis
刘明博士	舒泰神（北京）生物 制药股份有限公司	生物信息学在抗体工程中的应用
卢滇楠副教授	清华大学	How does CO ₂ diffuse into Carbonic Anhydrase: a multi-scale molecular simulation study
茆灿泉教授	西南交通大学	Cytotoxicity of a novel peptide P201 by down-regulation of the FoxM1 expression in cancer HepG2 cells
唐亚林研究员	中国科学院化学研究 所	分子模拟技术在癌症相关 RNA 二级结构检测的 新型探针设计中的应用
沈百荣教授	苏州大学	Computational Biomarker Discovery in the Big Data Era: from Translational Biomedical Informatics to Systems Medicine
岳俊杰研究员	军事医学科学院生物 工程研究所	蛋白质结构模拟在分子设计中的应用
张健教授	上海交通大学	Development of novel method on the evaluation of allosteric interactions
张子丁教授	中国农业大学	TBD
赵波教授	南京师范大学	TBD
赵一雷教授	上海交通大学	红霉素生物合成 DEBS 硫酯酶的预反应态与大 环内酯形成机制
郑清川教授	吉林大学	CYP 家族重要蛋白对底物的选择性及催化机制

三、会议学术委员会、组织委员会组成

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
冯华

• **秘书** 徐涛

• **学术委员会成员：**

步宇翔教授	曹泽星教授	陈岗教授	陈冀胜院士	陈凯先院士
陈难先院士	程卯生教授	崔田教授	杜冠华教授	段雪院士
冯华先生	高清志教授	郭宗儒教授	何铁宁研究员	侯廷军教授
胡社军教授	胡永洲教授	黄京飞教授	黄民教授	黄楠教授
黄维院士	蒋华良教授	蒋青教授	来鲁华教授	李晓霞教授
李亦学教授	李永旺教授	李有勇教授	柳百新院士	马健鹏教授
彭练矛教授	彭师奇教授	彭述明研究员	钱宇教授	沈倍奋院士
沈百荣教授	沈竞康教授	沈寅初院士	舒远杰研究员	帅志刚教授
苏为科教授	孙淮教授	唐亚林教授	田永君教授	王崇愚院士
王任小教授	汪文川教授	魏于全院士	吴锋教授	吴玉章教授
吴云东院士	徐如人院士	徐筱杰教授	杨光富教授	杨金龙教授
杨锐教授	杨胜勇教授	姚小军教授	尤启冬教授	苑世领教授
张红星教授	张礼和院士	张亮仁教授	张瑞勤教授	张希院士
赵国屏院士	赵景泰教授	仲崇立教授	周涵教授	周延春教授
朱维良研究员	Prof. Kyoung Tai No	Prof. Mike Payne		

■ **会议组织委员会：**

主任： 徐筱杰教授 沈竞康教授 蒋华良教授 周涵教授

副主任： 朱维良教授 赵纪军教授 代振宇教授

秘书长： 苏艳副教授

成员： 李晓霞教授 赵建军 冯华 徐涛 代亚东 陈思 蒋雪 周思

四、会议论文征集及墙报交流

■ **会议论文征集：**

1) 论文征集要求

题目：粗体 (Bold)，英文

作者：姓名，所在单位，地址，邮编，电子邮件

摘要：100-300 字，英文，如果使用了软件，请在摘要中注明软件名称

论文全文：中文或英文

投稿方向：请注明所属的分会主题

2) 参考文献

- 征文范围包括自 2014 年 5 月后已发表或未发表的文章。
- 如文章已经在某些杂志上发表过，请注明所发表的刊物及期刊影响因子。
- 有需要保密的数据请您在来稿前自行删除。
- 正文字体请用 12 号 Times New Roman 1.5 倍行距。请用 Word 排版，页边距上下 2.7 cm，左右 3.17 cm。
- 稿件后请附上联系方式，以便论文集的编辑者能与您及时取得联系。
- 投稿请以 e-mail 附件的方式提交：lunwen@neotrident.com
- 投稿截止日期：2016 年 9 月 10 日
- 论文集仅供参会人员内部进行学术交流所用，不作商业化印刷、发行。
- 论文一经录用，会议组委会在 2016 年 9 月 10 日前签发“论文摘要录用回复单”。

■ 墙报交流：

会议期间，将以墙报的方式安排部分会议论文的交流。需在 2016 年 9 月 10 日前将墙报摘要 EMAIL 到 lunwen@neotrident.com 邮箱，经学术委员会审核通过，会 Email 通知您在会前准备好墙报，并按指定地点自行粘贴、管理，会期间自由交流。

墙报规格：高 1.2m, 宽 0.9m

墙报交流地点：待定

墙报张贴时间：9 月 24 日下午 14:00-18:00

墙报交流时间：9 月 25 日至 26 日全天，自由交流

墙报撤展时间：9 月 26 日下午 18:00

五、会议费用、会议报到及报名方式

■ 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
外宾代表	USD350/人	USD300/人

说明：以上优惠只能选择其一，无叠加优惠。

■ 收费方式：

1) 银行汇款 (请在汇款时务必注明用途“ICMSI 注册费”，以及参会代表姓名。汇款后请将银行底单发至会务组邮箱 huiyi@neotrident.com)

户 名：北京创腾科技有限公司上海分公司

开户行：招商银行上海晨晖支行

账 户：121919707510501

2) 现场收取：现场支持刷卡

■ 会议报到：

1) 9月24日(周六)全天：在泰达美爵酒店大堂进行报到和注册，并在美居酒店下榻。

2) 9月25日(周日)上午：7:00-8:30 在泰达美爵酒店大堂进行报到和注册。

■ 报名方式：

您可以登录会议网站提交“在线报名”，或者下载 word 版本参会回执，填写后于 **9月15日前** 发送到 huiyi@neotrident.com 信箱 (**9月1日前报名并汇款，可以享受优惠价格**)。会务组工作人员收到您提交的参会回执后将用邮件方式与您确认。

六、住宿安排、乘车路线及地图

■ 住宿安排：

地点：大连泰达美爵美居酒店

地址：中山区中南路 205 号 (毗邻大连五 A 级风景区——老虎滩)

电话：(0411)82881999

住宿会务价格：330 元/间 (双标)，450 元/间 (公寓)

注：房间数量有限，按回执先后顺序安排房型。

■ 乘车路线：

• 机场：

出租：从大连周水子机场到酒店全程 18 公里，用时 45 分钟，打车需要 40 元左右。

公交：从周水子机场可乘坐 710 到人民路换 30 路到中翠街下，步行 150 米后到达酒店。

或从周水子机场乘 710 路公交车前往三八广场，然后乘坐 703 路公交车前往兴隆屯，下车即到。

• 北站：

出租：从大连北站到酒店全程 21.7 公里，用时 40 分钟，打车需要 50 元左右 (高铁 动车从这个站停)。

公交：可乘坐 1 路加车到终点站大连火车站，换 30 路在中翠街下，步行 150 米后到达酒店。

• 大连站：

出租：从大连站到酒店全程 5.5 公里，用时 20 分钟，打车需要 15 元左右。

公交：可乘坐火车站广场附近的 30 路，经过 10 站到中翠街下车，步行 150 米后到达酒店。

交通地图：



会议联系人：

北京创腾科技有限公司

施小姐：021-51821768 转 213；13795207001

陈女士：021-51821768 转 233；13916858963

大连理工大学：

赵纪军教授：0411-84708748

苏艳福教授：13940951562

- 报名信箱：huiyi@neotrident.com
- 论文投稿：lunwen@neotrident.com
- 会议网站：<http://icmsi.neotrident.com>

附【参会代表回执】

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

2016 年 7 月 20 日